



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΕΤΑΦΟΡΑΣ ΚΑΙ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗΣ
ΣΩΜΑΤΙΔΙΩΝ ΣΕ ΠΝΕΥΜΟΝΙΚΕΣ ΡΟΕΣ

Χρήστος Κουμπαράκης
Αριστείδης-Γεώργιος Στάμου

Επιβλέπων Καθηγητής: Βασίλης Μποντόζογλου

ΒΟΛΟΣ, ΣΕΠΤΕΜΒΡΙΟΣ 2019

© 2019 Χρήστος Κουμπάρκης, Αριστείδης-Γεώργιος Στάμου

Η έγκριση της διπλωματικής εργασίας από το Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας δεν υποδηλώνει αποδοχή των απόψεων των συγγραφέων (Ν. 5343/32 αρ. 202 παρ. 2).

Εγκρίθηκε από τα μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:

Πρώτος Εξεταστής Δρ. Βασίλης Μποντόζογλου
(Επιβλέπων) Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,
 Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Δεύτερος Εξεταστής Δρ. Νικόλαος Ανδρίτσος
 Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,
 Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Τρίτος Εξεταστής Δρ. Δημήτρης Βαλουγεώργης
 Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,
 Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Ευχαριστίες

Πρωτίστως, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μας , κ. Βασίλη Μποντόζογλου, για την ευκαιρία που μου έδωσε να εκπονήσω μαζί του τη διπλωματική μου εργασία σε ένα τόσο ενδιαφέρον αντικείμενο, και για την άμεση υποστήριξή του σε όλη τη διάρκειά αυτής. Επιπλέον, θέλω να ευχαριστήσω τα υπόλοιπα μέλη της εξεταστικής επιτροπής, κ. Νικόλαο Ανδρίτσο και κ. Δημήτρη Βαλουγεώργη για την ανάγνωση της εργασίας μας. Ιδιαίτερες ευχαριστίες στους καθηγητές του τμήματος, για τις πολύτιμες γνώσεις που μου προσέφεραν όλα αυτά τα χρόνια σε ένα τόσο ευρύ αντικείμενο όπως η μηχανολογία. Ευχαριστώ, ακόμη, τους φίλους μου και την κοπέλα μου, για τη στήριξη και την αγάπη τους όλα αυτά τα χρόνια.

Μα, πάνω απ'όλα, ένα μεγάλο ευχαριστώ στους γονείς μου, Γεώργιο και Μαρία, καθώς χωρίς την υλική και -κυρίως- ψυχολογική υποστήριξή τους, δε θα βρισκόμουν εδώ που είμαι σήμερα. Σας ευχαριστώ ολόψυχα.

Χρήστος

Αρχικά,θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή της διπλωματικής μας εργασίας κ. Βασίλη Μποντόζογλου που μας πρόσφερε τη δυνατότητα να συνεργαστούμε μαζί του σε ένα πολύ ενδιαφέρον θέμα και για την πολύτιμη βοήθεια και υποστήριξή του σε όλη τη διάρκεια της εργασίας. Επιπρόσθετα,είμαι ευγνώμων στους καθηγητές κ. Νικόλαο Ανδρίτσο και κ. Δημήτρη Βαλουγεώργη για την ανάγνωση της εργασίας μας.Επίσης,θα ήθελα να ευχαριστήσω τους υπόλοιπους καθηγητές του τμήματος για τις γνώσεις που μου πρόσφεραν κατά τη διάρκεια των σπουδών μου σε ένα πολύ ενδιαφέρον αντικείμενο όπως η μηχανολογία.Ακόμα, θα ήθελα να ευχαριστήσω τη κοπέλα μου και τους φίλους μου για τη στήριξη και την αγάπη τους όλα αυτά τα χρόνια.Κυρίως όμως θα ήθελα ολόψυχα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου για τη στήριξη και την αγάπη που μου παρείχαν σε όλη τη διάρκεια των σπουδών μου από την αρχή της σχολικής μου πορείας.

Αριστείδης-Γεώργιος

Περίληψη

Με την εξέλιξη της τεχνολογίας και την πρόοδο της ιατρικής επιστήμης, δίνεται έμφαση ολοένα και περισσότερο στην γρήγορη και αποτελεσματική θεραπεία των ασθενιών. Για το λόγο αυτό, η μεταφορά φαρμάκων στο αίμα με τη μορφή εισπνεόμενων σωματιδίων (αερολυμάτων - aerosols) κερδίζει έδαφος σε σχέση με τις παραδοσιακές μεθόδους. Τα εισπνεόμενα αερολύματα μεταφέρονται μέσω της ροής του αέρα στις κυψελίδες του πνεύμονα, και απο εκεί στο αίμα μέσω των τοιχωμάτων τους. Επομένως, είναι σημαντική η ανάπτυξη ενός μοντέλου για τη σωστή πρόβλεψη της μεταφοράς και της εναπόθεσης των σωματιδίων αυτών στις διάφορες περιοχές του αναπνευστικού συστήματος.

Στην παρούσα διπλωματική εργασία, παρουσιάζονται και επεξηγούνται τα διάφορα μέρη και οι διαδικασίες του αναπνευστικού συστήματος του ανθρώπου, κατασκευάζεται κατάλληλο μοντέλο για τους αεραγωγούς και τις κυψελίδες του πνεύμονα που βασίζεται σε έναν διαφορετικό-νέο όγκο ελέγχου σε σχέση με άλλα μοντέλα του εργαστηρίου για το ίδιο πρόβλημα. Στη συνέχεια, αναπτύσσονται οι αντίστοιχες εξισώσεις μεταφοράς μάζας των αερολυμάτων στις περιοχές αυτές οι οποίες διακριτοποιούνται αριθμητικά, με βάση τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου, επιλέγοντας το full implicit σχήμα για τη χρονική διακριτοποίηση.

Η διαφορά στη διπλωματική αυτή έγκειται στην θεώρηση των κυψελίδων ως ανεξάρτητα δοχεία πλήρους ανάμιξης, και στη δημιουργία δακτυλίων με κυψελίδες περιμετρικά των αεραγωγών. Τέτοια θεώρηση δεν υπήρχε μέχρι στιγμής στα μοντέλα του εργαστηρίου και, πιθανώς, με την κατάλληλη διακριτοποίηση σε αυτό το μοντέλο, θα εξαχθούν αποτελέσματα για τη συγκέντρωση των σωματιδίων που έρχονται σε μεγαλύτερη συμφωνία με τις πειραματικές μετρήσεις.

Περιεχόμενα

1. Εισαγωγή	1
2. Θεωρία του αναπνευστικού συστήματος	5
2.1 Δομή του αναπνευστικού συστήματος.....	5
2.2 Όγκοι και χωρητικότητες πνεύμονα.....	10
2.3 Ανάμιξη στις κυψελίδες.....	13
2.4 Πολυπλοκότητα προβλήματος.....	21
3. Μοντελοποίηση προβλήματος	23
3.1 Το μοντέλο A του Weibel	23
3.2 Επαναπροσδιορισμός μεγεθών πνεύμονα.....	25
3.3 Το μονοδιάστατο πρόβλημα - Μοντέλο Τρομπέτας (Trumpet Model).....	29
3.4 Μηχανισμοί Εναπόθεσης	30
3.4.1 Πιθανότητες εναπόθεσης σωματιδίων.....	31
3.4.2 Βασικοί συντελεστές και σύμβολα των μηχανισμών εναπόθεσης.....	32
3.4.3 Αδρανειακή Πρόσκρουση (Inertial Impaction).....	34
3.4.4 Βαρυτική καθίζηση(Gravitational settling)	37
3.4.5 Διάχυση Brownian (Brownian diffusion)	39
3.5 Μεταβολή των γεωμετρικών χαρακτηριστικών των πνευμόνων κατά την εισπνοή και εκπνοή.....	42
3.6 Ογκομετρικές παροχές.....	43
3.7 Εισπνοή	47
3.7.1 Εξισώσεις διατήρησης μάζας του αερολύματος κατά τη ροή του στους αεραγωγούς	48
3.7.2 Εισπνοή στις κυψελίδες	53
4. Αριθμητική ανάλυση του προβλήματος	57
4.1 Εισαγωγή στη Μέθοδο Πεπερασμένων Όγκων Ελέγχου	57
4.1.1 Διακριτοποίηση σε πρόβλημα μεταφοράς μάζας με μοριακή διάχυση	57
4.1.2 Οι τέσσερις βασικοί κανόνες (Four Basic Rules)	60
4.1.3. Διακριτοποίηση σε πρόβλημα μεταφοράς θερμότητας με συναγωγή	61
4.1.4 Διακριτοποίηση σε σχήμα ανάντη διαφορών	63
4.1.5 Διακριτοποίηση σε πρόβλημα μεταφοράς μάζας με μοριακή διάχυση για μη μόνιμες συνθήκες.....	64
4.2 Χωρική Διακριτοποίηση.....	66

4.2.1 Χρονική Διακριτοποίηση.....	71
4.3.1 Εισπνοή στους αεραγωγούς.....	72
4.3.2 Εισπνοή στις κυψελίδες.....	81
4.4 Εκπνοή.....	83
4.4.1 Εκπνοή στους αεραγωγούς.....	85
4.4.2 Εκπνοή στις κυψελίδες.....	92
5. Σύνοψη – Μελλοντικοί Στόχοι.....	95
Βιβλιογραφία.....	98

1. Εισαγωγή

Καθημερινά, δισεκατομμύρια σωματιδίων εισπνέονται μαζί με τον ατμοσφαιρικό αέρα από κάθε άνθρωπο. Κάθε σωματίδιο με διάμετρο μικρότερη των 10 μm μπορεί να γίνει βιολογικά ενεργό σε επιρρεπείς οργανισμούς. Τα σωματίδια μπορεί να έχουν τοξικό ρόλο, όπως οι αέριοι ρύποι της ατμόσφαιρας που μεταφέρονται στον πνεύμονα μαζί με τον εισπνεόμενο αέρα ή τη σκόνη. Όμως, μπορούν να χρησιμοποιηθούν και για θεραπευτικούς σκοπούς, όπως τα αερολύματα (aerosols), που χρησιμοποιούνται ευρέως για την καταπολέμηση ασθενειών που σχετίζονται με τον πνεύμονα. Έτσι, η μελέτη της εναπόθεσης τέτοιων σωματιδίων στον πνεύμονα έχει διττό χαρακτήρα, καθώς εξετάζονται από τη μία οι τοξικές παρενέργειες των αέριων ρύπων και από την άλλη η αποτελεσματικότητα της θεραπείας μέσω των εισπνεόμενων αερολυμάτων. Στην παρούσα διπλωματική εργασία θα εξεταστούν μόνο τα αερολύματα (aerosols), που χρησιμοποιούνται για θεραπευτικούς σκοπούς.

«Ως αερόλυμα (aerosol) χαρακτηρίζεται οποιοδήποτε μετασταθές αιώρημα ενός πληθυσμού σωματιδίων (στερεών, υγρών η μίγμα πολλαπλών φάσεων) εγκλεισμένων στον όγκο ενός αέριου μέσου.»

Η εισπνοή αερολυμάτων κερδίζει ολοένα και περισσότερο έδαφος στις θεραπείες ασθενειών που σχετίζονται με το αναπνευστικό σύστημα. Αυτό συμβαίνει διότι αυτή η μέθοδος προσφέρει το πλεονέκτημα της γρήγορης μεταφοράς και εναπόθεσης βιοενεργών ουσιών στην περιοχή ενδιαφέροντος. Ακόμη ένα πλεονέκτημα της εισπνοής αερολυμάτων αποτελεί το γεγονός ότι απαιτείται μικρότερη φαρμακευτική δόση απ'ότι η δια στόματος ή ενδοφλέβια αγωγή. Στοχεύοντας τις κατάλληλες περιοχές εναπόθεσης στον πνεύμονα, η θεραπευτική αποτελεσματικότητα των εισπνεόμενων αερολυμάτων μπορεί να βελτιωθεί, μειώνοντας παράλληλα τις παρενέργειές τους (Labiris & Dolovich, 2003). Στον παρακάτω πίνακα συνοψίζονται τα πλεονεκτήματα και τα μειονεκτήματα των τριών κύριων μέσων μεταφοράς θεραπευτικών ουσιών στον οργανισμό.

Πίνακας 1.1: Πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα εισπνεόμενων φαρμακευτικών αερολυμάτων σε σύγκριση με στοματική ή ενδοφλέβια πρόσληψη (Finlay W.H., 2001).

Route	Advantages	Disadvantages
Oral	<ul style="list-style-type: none"> • Safe • Convenient • Inexpensive 	<ul style="list-style-type: none"> • Unpredictable and slow absorption (e.g. foods ingested with drug can affect drug) • For lung disease: drug not localized to the lung (systemic side effects may occur) • Large drug molecules may be inactivated
Needle	<ul style="list-style-type: none"> • Predictable and rapid absorption (particularly with i.v.) 	<ul style="list-style-type: none"> • Requires special equipment and trained personnel (e.g. sterile solutions) • Improper i.v. can cause fatal embolism • For lung disease: drug not localized to the lung (systemic side effects may occur) • Infection
Inhaled aerosol	<ul style="list-style-type: none"> • Safe • Convenient • Rapid and predictable onset of action • Decreased adverse reactions • Smaller amounts of drug needed (particularly for topical treatment of lung diseases) 	<ul style="list-style-type: none"> • May have decreased therapeutic effect, e.g. in severe asthma other routes may be more beneficial • Unpredictable and variable dose • For systemic delivery: some drugs poorly absorbed or inactivated

Επομένως, είναι σημαντική η ακριβής πειραματική ή/και υπολογιστική εξομοίωση και πρόβλεψη της ροής αέρα και της αντίστοιχης εναπόθεσης των σωματιδίων που αυτός περιέχει, στον πνεύμονα. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω της δόμησης σωστών και ρεαλιστικών μοντέλων του ανθρώπινου αναπνευστικού συστήματος. Βασικούς στόχους τέτοιων μοντέλων αποτελούν, όπως έχει συζητηθεί, η βαθιά κατανόηση της ανταλλαγής αερίων που λαμβάνουν χώρα μεταξύ των κυψελίδων και του αίματος, η εναπόθεση και η αξιολόγηση των αποτελεσμάτων της εισπνοής αερίων, τοξικών ρύπων του περιβάλλοντος καθώς και η βελτιστοποίηση της θεραπείας μέσω αερολυμάτων.

Υπάρχει πληθώρα μοντέλων στη βιβλιογραφία που προβλέπουν την εναπόθεση στις διάφορες περιοχές του αναπνευστικού συστήματος. Σύμφωνα με τον Finlay (Finlay W.H., 2001) τα μοντέλα πρόβλεψης και εναπόθεσης σωματιδίων χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες οι οποίες είναι οι παρακάτω :

- Εμπειρικά μοντέλα (Empirical models)
- Λαγκραζιανά δυναμικά μοντέλα (Lagrangian dynamical models)
- Οϊλεριανά δυναμικά μοντέλα (Eulerian dynamical models)

Ο παρακάτω πίνακας παρουσιάζει τα μοντέλα της βιβλιογραφίας που είναι παρατεταγμένα σύμφωνα με τις παραπάνω τρεις κατηγορίες.

Πίνακας 1.2: Ταξινόμηση βιβλιογραφικών μοντέλων στις τρεις κατηγορίες (Finlay W.H., 2001)

Empirical models	Lagrangian dynamical models	Eulerian dynamical models
ICRP (1994), Yu <i>et al.</i> (1992), Rudolf <i>et al.</i> (1990), Rudolf <i>et al.</i> (1986), Davies (1982)	Finlay and Stapleton (1995), Darquenne and Paiva (1994), Koblinger and Hofmann (1990), Ferron <i>et al.</i> (1988), Persons <i>et al.</i> (1987), Martonen (1983), Yeh and Schum (1980), Gerrity <i>et al.</i> (1979), ICRP (1966), Beeckmans (1965), Landahl (1950), Findeisen (1935)	Edwards (1995), Scott and Taulbee (1985), Egan and Nixon (1985), Taulbee <i>et al.</i> (1978), Taulbee and Yu (1975)

Τα εμπειρικά μοντέλα βασίζονται κυρίως σε πειραματικά δεδομένα με βάση τα οποία προσαρμόζονται οι παράμετροι του μοντέλου (π.χ. συγκεκριμένη μορφολογία πνεύμονα) και επομένως οι αλγεβρικές εξισώσεις που θα σχηματιστούν. Άρα, η εξαγωγή των αλγεβρικών εξισώσεων βασίζεται κατά κύριο λόγο σε παραμέτρους που επιλέγονται και όχι σε εξισώσεις που βασίζονται με τη κίνηση του ρευστού ή του σωματιδίου. Τα κύρια πλεονεκτήματα των εμπειρικών μοντέλων είναι το χαμηλό υπολογιστικό φορτίο και η ευκολία στη χρήση. Αντίστοιχα, το βασικό μειονέκτημα είναι το περιορισμένο εύρος εφαρμογής του μοντέλου διότι οι παράμετροι που θα χρησιμοποιηθούν αναφέρονται σε συγκεκριμένα χαρακτηριστικά πειραματικής διάταξης από την οποία πάρθηκαν τα δεδομένα.

Τα Λαγκραζιανά μοντέλα βασίζονται σε διαφορετική λογική σε σχέση με τα εμπειρικά μοντέλα. Συγκεκριμένα, οι υπολογισμοί βασίζονται στις εξισώσεις που εκφράζουν την κίνηση του ρευστού και των σωματιδίων σε ένα σύστημα αναφοράς που κινείται μαζί με το αερόλυμα και όχι σε πειραματικά δεδομένα. Επομένως, είναι φανερό ότι ένα πλεονέκτημα που έχει η συγκεκριμένη μέθοδος είναι ότι εφαρμόζεται σε ποικιλία συνθηκών.

Τέλος, τα Οϊλεριανά μοντέλα σε αντίθεση με τα Λαγκραζιανά έχουν τη διαφοροποίηση ότι οι εξισώσεις κίνησης εκφράζονται ως προς ένα ακίνητο σύστημα αναφοράς, καθώς τα υπόλοιπα χαρακτηριστικά που αναφέραμε παραπάνω για τα Λαγκραζιανά μοντέλα είναι κοινά διότι και τα δύο μοντέλα ανήκουν στη γενική κατηγορία των δυναμικών μοντέλων.

Η επίλυση του προβλήματος σύμφωνα με το Οϊλεριανό δυναμικό μοντέλο (Eulerian dynamical model) μπορεί να γίνει σαν τρισδιάστατο μοντέλο, όπου η επίλυση θα γίνει με χρήση υπολογιστικής ρευστομηχανικής (CFD-computational fluid dynamics) είτε με αναγωγή σε μονοδιάστατο μοντέλο(one-dimensional model).

Στη συγκεκριμένη διπλωματική εργασία, θα χρησιμοποιήσουμε μονοδιάστατο Οϊλεριανό μοντέλο, σύμφωνα με το οποίο έχουμε ένα ακίνητο σύστημα αναφοράς ως προς το οποίο θα εκφραστούν οι εξισώσεις μεταφοράς μάζας του αερολύματος κατά τη χωρική συντεταγμένη που είναι το βάθος x . Υποθέτουμε ότι το βάθος x ξεκινάει από τη τραχεία με αποτέλεσμα στην είσοδο της να ισχύει ότι $x=0$. Επίσης, κατά την ανάλυση του προβλήματος θεωρούμε ότι τα εισπνεόμενα σωματίδια του αερολύματος έχουν όλα την ίδια διάμετρο και τα χαρακτηριστικά τους είναι δεδομένα από τη βιβλιογραφία. Τέλος, είναι σημαντικό να τονίσουμε ότι επειδή η γεωμετρία του αναπνευστικού συστήματος είναι τρισδιάστατη, ανάγουμε την ανάλυση του συγκεκριμένου προβλήματος σε μονοδιάστατη όπως θα εξηγήσουμε και θα αιτιολογήσουμε στα επόμενα κεφάλαια.

2. Θεωρία του αναπνευστικού συστήματος

2.1 Δομή του αναπνευστικού συστήματος

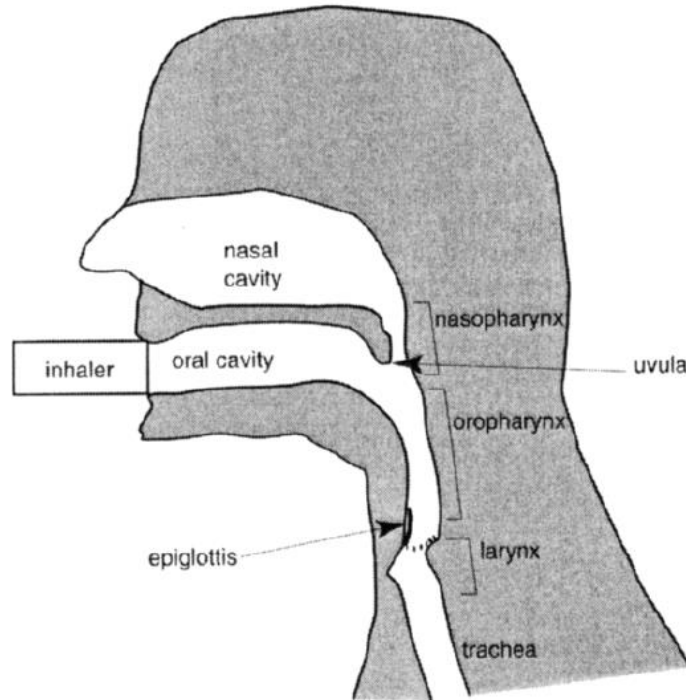
Το ανθρώπινο αναπνευστικό σύστημα, αποτελείται από οδούς που φιλτράρουν τον εισερχόμενο αέρα, και τον μεταφέρουν στον πνεύμονα και κατ'επέκταση σε μικροσκοπικούς σάκους. Εκεί, γίνεται ανταλλαγή αερίων - διοξειδίου του άνθρακα (CO₂) και οξυγόνου (O₂) – με το αίμα. Η διαδικασία αυτή ανταλλαγής αερίων μεταξύ της ατμόσφαιρας και των κυττάρων ονομάζεται **αναπνοή**.

Το αναπνευστικό σύστημα απαρτίζεται από τρεις βασικές περιοχές. Την **εξωθωρακική περιοχή (extrathoracic region)**, την **τραχειοβρογχική περιοχή (trachea-bronchial region)** και την **κυψελιδική περιοχή (alveolar region)**. Συχνά, ο συνδυασμός τραχειοβρογχικής και κυψελιδικής περιοχής καλείται **πνεύμονας (lung)**.

Η **εξωθωρακική περιοχή (extrathoracic region)** -συχνά αποκαλούμενη ως “upper-airways”, αποτελείται από τα ακόλουθα μέρη:

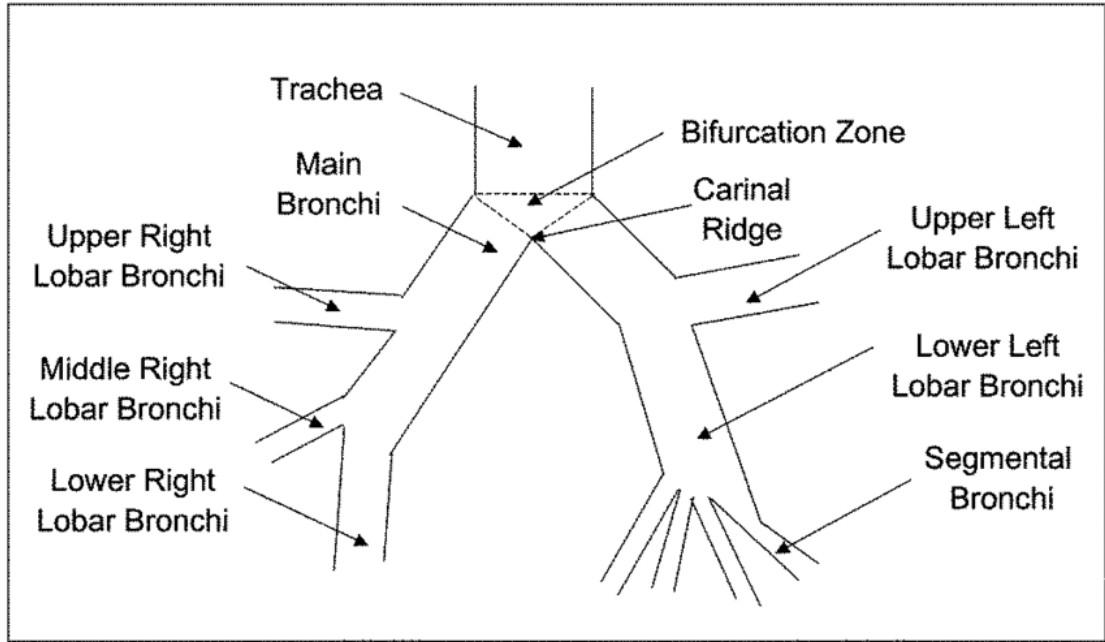
- **Στοματική κοιλότητα (oral/buccal cavity)**, που αποτελείται από το στόμα
- **Ρινική κοιλότητα (nasal cavity)**, που αποτελείται από τη μύτη
- **Φάρυγγας (pharynx)**, που αποτελεί το κομμάτι του λαιμού μεταξύ του λάρυγγα και του στόματος (oropharynx) ή της μύτης (nasopharynx). Ο φάρυγγας διακλαδώνεται σε δύο αγωγούς. Ο πρώτος είναι ο οισοφάγος, και αποτελεί το πέρασμα για τη τροφή προς το στομάχι. Ο δεύτερος, είναι ο λάρυγγας, ο οποίος αποτελεί πέρασμα του αέρα προς τους μετέπειτα αεραγωγούς του αναπνευστικού συστήματος.
- **Λάρυγγας (larynx)**, ο οποίος αποτελεί το τμήμα πριν την τραχεία, και σε αυτόν συναντάμε τις φωνητικές χορδές. Επιπροσθέτως, σε αυτό το τμήμα βρίσκεται η **επιγλωττίδα**, η οποία «κλείνει», κατά την κατάποση, εμποδίζοντας την τροφή και τα υγρά να εισέλθουν στον πνεύμονα. Ο φάρυγγας μαζί με τον λάρυγγα, αποτελούν τον λαιμό (**throat**).

Παρακάτω παρατίθεται η αναπαράσταση της εξωθωρακικής περιοχής του αναπνευστικού συστήματος καθώς και των επιμέρους τμημάτων της.

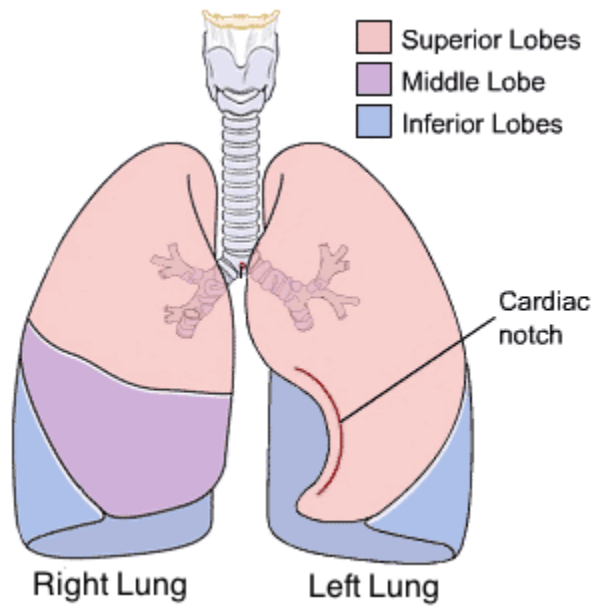


Σχήμα 2.1: Σχηματική αναπαράσταση της εξωθωρακικής περιοχής (extrathoracic region) (Finlay W.H.,2001).

Η **τραχειοβρογχική περιοχή** (trachea-bronchial region) -συνχά αποκαλούμενη και ως "lower-airways"- , αποτελείται από αεραγωγούς που μεταφέρουν τον αέρα από τον λάρυγγα έως τις περιοχές ανταλλαγής αερίων (gas exchange regions) του πνεύμονα. Αρχικά , στην περιοχή αυτή συναντάμε την **τραχεία (trachea)**, η οποία θεωρείται ως η μηδενική γενιά. Οι επόμενες τρεις γενιές στις οποίες διακλαδίζεται η τραχεία, έχουν όλες ονόματα. Την πρώτη γενιά αποτελούν οι δύο αεραγωγοί στους οποίους διακλαδίζεται η τραχεία και ονομάζονται **πρωτεύοντες βρόγχοι (main bronchi)**. Με τη σειρά τους, διακλαδίζονται στους **δευτερεύοντες βρόγχους (lobar bronchi)**, οι οποίοι διακλαδίζονται στους **τριτογενείς βρόγχους (segmental bronchi)**. Αξίζει να σημειωθεί, ότι υπάρχουν δύο δευτερεύοντες βρόγχοι στο αριστερό κομμάτι του πνεύμονα και τρεις στο δεξί. Αυτοί, ορίζουν και τα διαφορετικά κομμάτια του πνεύμονα, τα οποία καλούνται **λοβοί (lobes)**. Έτσι, έχουμε δύο λοβούς στον αριστερό πνεύμονα και τρεις στον δεξί. Οι λοβοί με τη σειρά τους χωρίζονται σε μικρότερα τμήματα που ονομάζονται βρογχοπνευμονικά τμήματα, και ορίζονται απο τους τριτογενείς βρόγχους, όπως φαίνεται στην παρακάτω εικόνα.



Σχήμα 2.2: Σχηματική απεικόνιση τραχειοβρογχικής περιοχής και διάκριση βρόγχων.

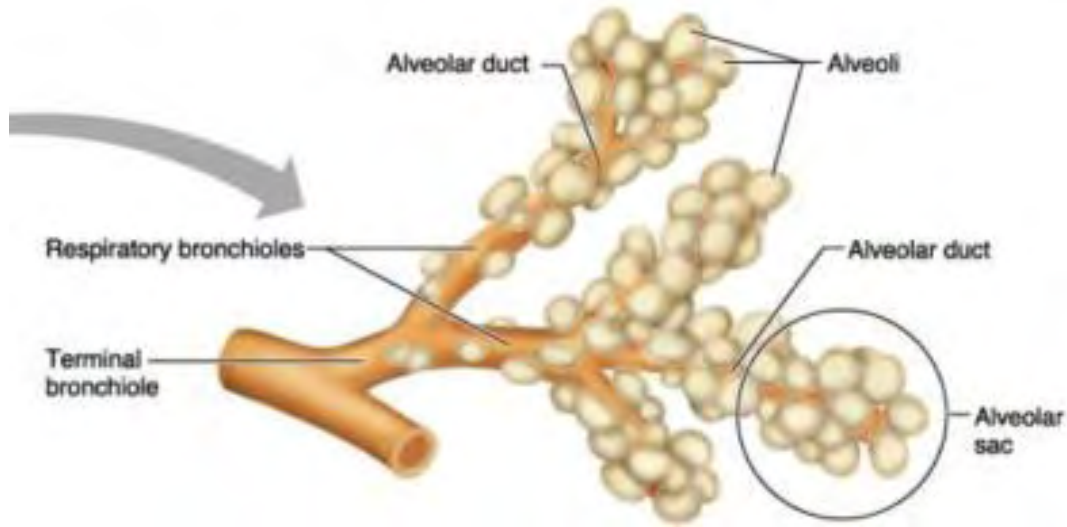


Σχήμα 2.3: Λοβοί πνεύμονα.

Μετά τις τρεις πρώτες γενιές, οι διακλαδώσεις συνεχίζονται με αεραγωγούς που καλούνται **βρογχιόλια (bronchioles)**. Οι αεραγωγοί της τελευταίας γενιάς της τραχειοβρογχικής περιοχής καλούνται «**τερματικά βρογχιόλια (terminal bronchioles)**».

Στα τοιχώματα των αεραγωγών της τραχειοβρογχικής περιοχής συναντάμε μικρές **βλεφαρίδες (cilia)**, που καλύπτονται από ένα στρώμα φλέγματος (mucus). Οι βλεφαρίδες κινούνται συντονισμένα, δίνοντας έτσι κίνηση και στο στρώμα φλέγματος, το οποίο, μέσω του λαιμού, καταπίνεται. Σε αυτό το στρώμα, επικαθίζονται αρκετά από τα εισπνεόμενα σωματίδια. Οπότε, ο μηχανισμός αυτός βοηθάει στη διατήρηση του πνεύμονα «καθαρού» από επιβλαβή σωματίδια και βακτήρια που μπορεί να περιέχονται στον αέρα που εισπνέεται και κυρίως στη σκόνη.

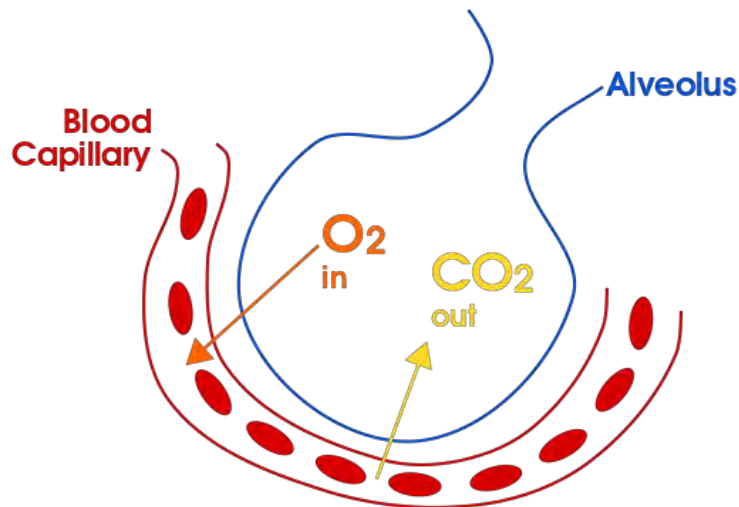
Τα τερματικά βρογχιόλια, διακλαδίζονται σε ακόμη μικρότερους θυγατρικούς αεραγωγούς, που αποτελούν την πρώτη γενιά της **κυψελιδικής περιοχής (alveolar region)** -συχνά αποκαλούμενη και ως parenchyma ή pulmonary region-, και καλούνται «**αναπνευστικά βρογχιόλια (respiratory bronchioles)**». Η κυψελιδική περιοχή αποτελείται από αεραγωγούς καλυμένους με **κυψελίδες (alveoli)**. Όσο πιο βαθιά προχωράμε προς τον πνεύμονα, σε κάθε γενιά τα αναπνευστικά βρογχιόλια καλύπτονται με όλο και περισσότερες κυψελίδες, έως ότου φτάσουμε σε αεραγωγούς οι οποίοι καλύπτονται εξ'ολοκλήρου με αυτές. Οι αεραγωγοί που έχουν αυτή την ιδιότητα **αποκαλούνται «κυψελιδικοί αγωγοί (alveolar ducts)**. Τελευταία γενιά της κυψελιδικής περιοχής αποτελούν οι **κυψελιδικοί σάκοι (alveolar sacs)**. Ορισμένες φορές χρησιμοποιείται ο όρος «**acinus**», για να περιγράψει όλες τις θυγατρικές γενιές που προκύπτουν από ένα τερματικό βρογχιόλι.



Σχήμα 2.4: Σχηματική αναπαράσταση των γενιών της κυψελιδικής περιοχής του πνεύμονα.

Οι **κυψελίδες (alveoli)** είναι μικροί σάκοι γεμάτοι αέρα, και καταλαμβάνουν χώρο γύρω από τους αεραγωγούς του πνεύμονα. Εκεί λαμβάνει χώρα η ανταλλαγή αερίων με το αίμα. Το σχήμα των κυψελίδων, παρότι στην παρούσα εργασία θεωρείται σφαιρικό, στην πραγματικότητα δεν είναι απόλυτα, παρα μόνο τα 3/4 αυτού (Hansen and Ampraya, 1975). Ως ποσότητες, οι κυψελίδες σε ένα μέσο πνεύμονα αριθμούν περίπου 300 εκατομμύρια (Weibel, 1963). Όμως, σύμφωνα με πρόσφατες έρευνες, ο αριθμός τους κυμαίνεται στο φάσμα των 274-790 εκατομμυρίων, ενώ όσο μεγαλύτερος είναι ο όγκος του πνεύμονα, τόσο περισσότερες κυψελίδες του αναλογούν (Ochs et al., 2004).

Στον ανθρώπινο πνεύμονα υπάρχουν περίπου 17 εκατομμύρια αγωγοί, το αθροιστικό μήκος των οποίων φτάνει την τάξη των 9 km, αλλά η διάταξή τους είναι τέτοια ώστε η μέση απόσταση μεταξύ στόματος και κυψελίδων δεν ξεπερνά τα 20-40 cm (Weibel et al. 2005).



Σχήμα 2.5: Ανταλλαγή αερίων (O_2 , CO_2) μεταξύ κυψελίδας και αίματος. Το οξυγόνο διαχέεται από τον αέρα της κυψελίδας προς το αίμα εντός του τριχοειδούς αγγείου, ενώ το διοξείδιο του άνθρακα ακολουθεί την αντίθετη πορεία.

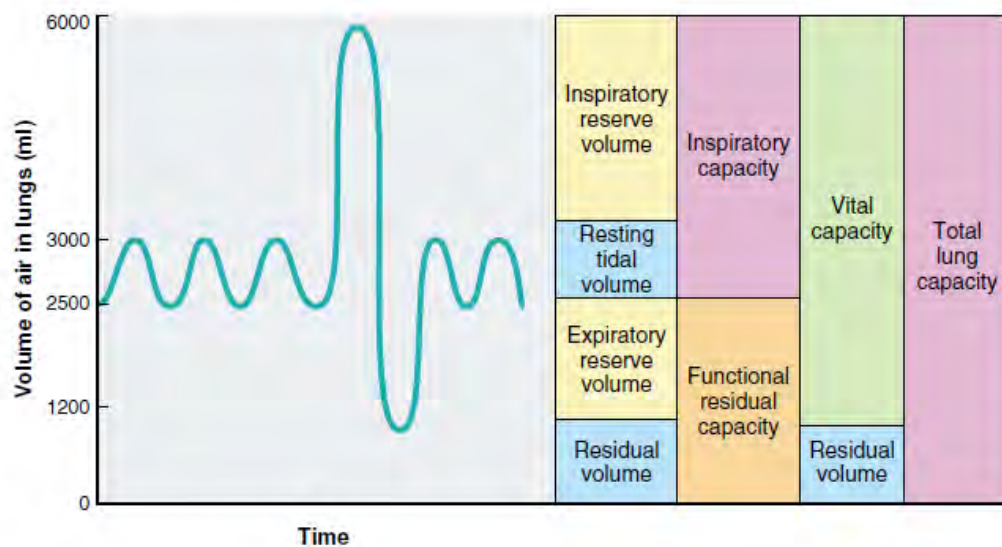
2.2 Όγκοι και χωρητικότητες πνεύμονα

Οι όγκοι του πνεύμονα ορίζονται με βάση τον χώρο που καταλαμβάνει ο αέρας στις περιοχές του. Οι όγκοι χωρίζονται σε στατικούς και δυναμικούς (Lung volumes and forced ventilatory flows, Quanjer et al 1993). Οι χωρητικότητες προκύπτουν από το άθροισμα δύο ή περισσότερων όγκων. Οι βασικοί όγκοι και χωρητικότητες παρουσιάζονται παρακάτω.

- Αναπνεόμενος όγκος (Tidal Volume) , V_t : Ο όγκος αέρα που εισπνέεται ή εκπνέεται κατά τη διάρκεια ενός κύκλου αναπνοής, σε κανονικές συνθήκες.
- Εφεδρικός Εισπνεόμενος Όγκος (Inspiratory Reserve Volume), IRV : Ο μέγιστος όγκος αέρα που μπορεί κάποιος να εισπνεύσει, μετά το τέλος μιας κανονικής αναπνοής.
- Εφεδρικός Εκπνεόμενος Όγκος (Expiratory Reserve Volume), ERV : Ο μέγιστος όγκος αέρα που μπορεί κάποιος να εκπνεύσει, μετά το τέλος μιας κανονικής αναπνοής.
- Υπολειπόμενος όγκος (Residual Volume) , RV : Ο υπολειπόμενος όγκος αέρα στον χώρο του πνεύμονα, μετά το τέλος μίας μέγιστης εκπνοής.
- Λειτουργική Υπολειπόμενη Χωρητικότητα (Functional Residual Capacity) , FRC : Ο όγκος αέρα που βρίσκεται στον πνεύμονα και τους αεραγωγούς λίγο πριν την εισπνοή, σε κανονικές συνθήκες.
- Ολική Πνευμονική Χωρητικότητα (Total Lung Capacity) , TLC : Ο όγκος αέρα στον χώρο του πνεύμονα μετά το τέλος μίας μέγιστης εισπνοής.

- Ζωτική Χωρητικότητα (Vital Capacity) , VC : Ο μέγιστος όγκος αέρα που μπορεί να εισπνεύσει κάποιος. Καθώς πηγαίνουμε απο RV → TLC.
- Αναπνευστική Χωρητικότητα (Inspiratory Capacity), IC : Ο μέγιστος όγκος αέρα που μπορεί να εισπνευθεί πριν την έναρξη μιας κανονικής εισπνοής (ή μετά το τέλος μιας κανονικής εκπνοής).

Επιπλέον μεταβλητή αποτελεί και η Συχνότητα Αναπνοής (Breathing Frequency) f , δηλαδή ο αριθμός των κανονικών αναπνοών ανά λεπτό.



Σχήμα 2.6: Όγκοι και χωρητικότητες του πνεύμονα, καταγεγραμμένοι κατά τη σπιρομέτρηση. (Arthur Vander, James Sherman, Dorothy Luciano, 2001)

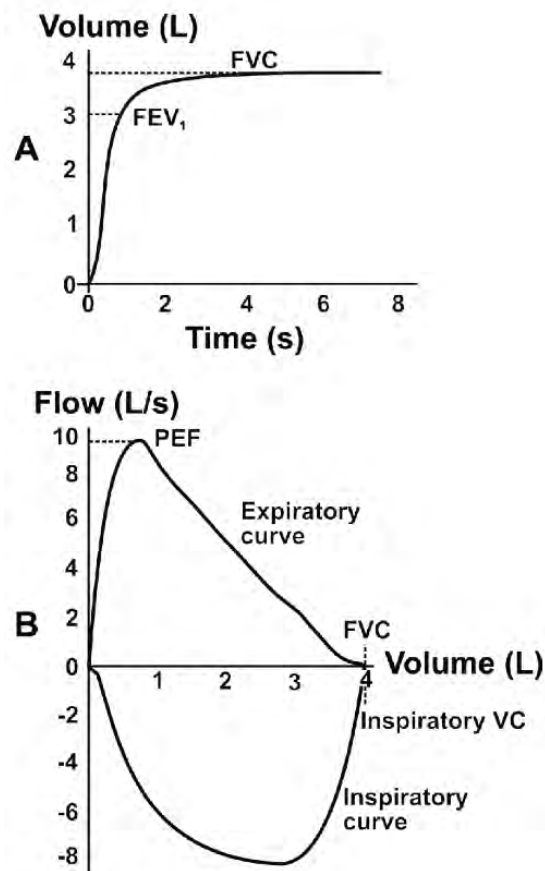
Υπάρχουν διάφοροι παράγοντες που μπορεί να επηρεάσουν το μέγεθος του πνεύμονα. Μερικοί από αυτούς είναι το ύψος, το βάρος, οι συνήθειες, το φύλο, η ηλικία, ο αθλητισμός κ.α.

Οι όγκοι του πνεύμονα μπορούν να μετρηθούν για κάθε άνθρωπο, με μία διαδικασία που ονομάζεται σπιρομέτρηση (spirometry). Η σπιρομέτρηση, είναι μια εξέταση ώστε να εκτιμηθεί η λειτουργική κατάσταση των πνευμόνων (και συγκεκριμένα ο όγκος και η ταχύτητα-ροή εισπνοής/εκπνοής του αέρα) και να ανακαλυφθούν τυχόν παθήσεις. Κατά τη σπιρομέτρηση, ο ασθενής καλείται να εισπνεύσει όσο περισσότερο αέρα μπορεί, κι έπειτα να εκπνεύσει όσο πιο δυνατά και για όσο

μεγαλύτερο χρονικό διάστημα μπορεί (συνήθως άνω των 6 δευτερολέπτων) σε μία συσκευή που ονομάζεται σπιρόμετρο. Το σπιρόμετρο μπορεί και μετράει με ακρίβεια τον αέρα που κατακρατείται και διακινείται από τους πνεύμονες. Με αυτόν τον τρόπο, το σπιρόμετρο παράγει γραφήματα που καλούνται σπιρογράμματα, και τα οποία έχουν μία εκ των εξής μορφών:

- Όγκου αέρα - χρόνου, με τον όγκο στον Y-άξονα και τον χρόνο στον X-άξονα.
- Ογκομετρικής παροχής - Όγκου, με την ογκομετρική παροχή στον Y-άξονα και τον συνολικό όγκο στον X-άξονα.

Οι τρεις πρώτοι όγκοι μπορούν να μετρηθούν μέσω της σπιρομέτρησης ενώ ο τελευταίος (RV), μπορεί να μετρηθεί μέσω της χρήσης κατάλληλων αέριων διαλυμάτων. Παραδείγματα των γραφημάτων που παράγει η σπιρομέτρηση φαίνονται παρακάτω.



Σχήμα 2.7: Αποτελέσματα σπιρομέτρησης. Α) Καμπύλη όγκου - χρόνου. Β) Καμπύλη ογκομετρικής παροχής - όγκου. (Koegelenberg C F N, Swart F, Irusen E M, 2012)

FEV₁ (Forced Expiratory Volume in 1 second): Όγκος αέρα που μπορεί το άτομο να εκπνεύσει σε 1 δευτερόλεπτο.

FVC (Forced Vital Capacity): Ο όγκος αέρα που εκπνέεται κατά τη διάρκεια μιας εξαναγκασμένης εκπνοής, ξεκινώντας από τη θέση μέγιστης εισπνοής και καταλήγοντας σε πλήρη εκπνοή. Με τη βοήθεια αυτού του μεγέθους προσδιορίζεται και ο ζωτικός όγκος (vital capacity).

PEF (Peak Expiratory Flow): Η μέγιστη εκπνεόμενη ροή αέρα. Μέγιστο σημείο της καμπύλης του διαγράμματος Ογκομετρικής Παροχής-Όγκου.

2.3 Ανάμιξη στις κυψελίδες

Το κλάσμα των εισπνεόμενων σωματιδίων που πραγματικά καταλήγει και εναποτίθεται στα τοιχώματα των κυψελίδων εξαρτάται από τον τρόπο με τον οποίο ο αέρας που τα περιέχει αναμειγνύεται με τα αέρια των κυψελίδων. Έτσι, ο τρόπος ανάμιξης στις κυψελίδες μπορεί να έχει σημαντικές παθοφυσιολογικές επιπτώσεις.

Στην κυψελιδική περιοχή, ο αριθμός Reynolds λαμβάνει τιμές πολύ μικρότερες της μονάδας ενώ η κίνηση των κυψελιδικών τοιχωμάτων είναι κινηματικά αντιστρεπτή. Για το λόγο αυτό η ροή στο εσωτερικό των κυψελίδων αρχικά θεωρούνταν αντιστρεπτή (Taylor, 1960).

Παρ' όλα αυτά, υπήρχαν υπόνοιες ότι ακόμα και σε χαμηλούς αριθμούς Reynolds, μπορεί να υπάρξει χαοτική ροή (Ottino, 1989). Οι Henry και Tsuda, μέσα από σειρά μαθηματικών μοντέλων, πειραμάτων, προσομοιώσεων και παρατηρήσεων, κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι η ανάμιξη στις κυψελίδες μπορεί να θεωρηθεί χαοτική, ενώ ένα σφάλμα στο προηγούμενο μοντέλο υπήρξε το γεγονός ότι δεν λάμβαναν υπόψη τις λεπτομέρειες της τοπικής δομής της κυψελιδικής ροής. Ως αποτέλεσμα της χαοτικής ανάμιξης, η ροή στις κυψελίδες μπορεί να θεωρηθεί κινηματικά μη αντιστρεπτή.

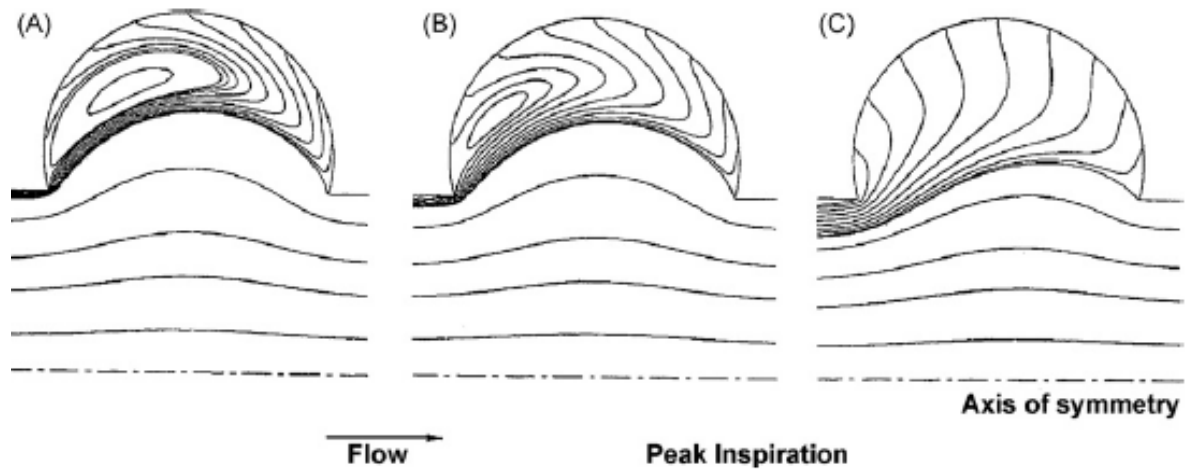
Τα ευρήματα της έρευνάς τους έδειξαν επίσης ότι στις κυψελίδες υπάρχει έντονη παρουσία ανακυκλοφορίας, κάτι που οφείλεται στη διατμητική -ως προς το άνοιγμα της κυψελίδας- ροή του αέρα στους αεραγωγούς. Η κάθε κυψελίδα διαστέλλεται με περίπου τον ίδιο ρυθμό, οπότε η ροή που εισέρχεται στις κυψελίδες

(\dot{Q}_A), θεωρείται σταθερή. Αντιθέτως, η ροή στον αγωγό που διέρχεται εφαιπτομενικά στο άνοιγμα των κυψελίδων (\dot{Q}_D) εξαρτάται από τον διαστελλόμενο όγκο του πνεύμονα, γειτονικού προς την κυψελίδα που μας ενδιαφέρει. Με δεδομένο ότι ο αριθμός Reynolds είναι παντού πολύ μικρότερος της μονάδας, τα χαρακτηριστικά της ροής σε κάθε κυψελίδα εξαρτώνται κυρίως από το λόγο (\dot{Q}_A/\dot{Q}_D), ο οποίος ακολούθως επηρεάζει την ανάμιξη και εναπόθεση των σωματιδίων. Ο λόγος αυτός εξαρτάται από τη γεωμετρία του πνεύμονα, και όσο μικρότερος, τόσο μεγαλύτερη η ανακυκλοφορία εντός των κυψελίδων. Όσον αφορά τα εισπνεόμενα σωματίδια, όσο μεγαλύτερη η ανακυκλοφορία, τόσο βαθύτερα εναποτίθενται στις κυψελίδες και τόσο πιο μη αντιστρεπτή τροχιά ακολουθούν κατά την εκπνοή.

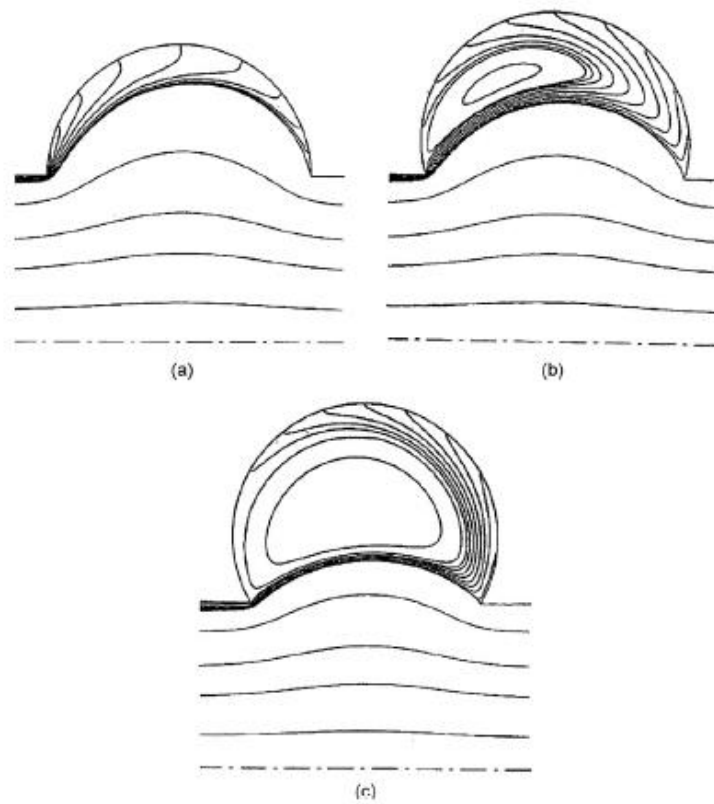
Επομένως το αν θα υπάρξει ανακυκλοφορία ή όχι, εξαρτάται από το λόγο (\dot{Q}_A/\dot{Q}_D), και όχι από τον αριθμό Reynolds. Διάφορες εκτιμήσεις του λόγου (\dot{Q}_A/\dot{Q}_D) σε κάθε γενιά παρουσιάζονται στον πίνακα.

Gen.	Re	Pe (5 nm)	Pe (500 nm)	St	α	Q_A/Q_D
15	1.606	126	3.28×10^7	0.0001	0.04	0.0003
16	0.798	62.5	1.63×10^7	0.0003	0.04	0.0006
17	0.393	30.8	8.03×10^6	0.0006	0.04	0.0011
18	0.192	15.03	3.92×10^6	0.0012	0.04	0.0023
19	0.092	7.20	1.88×10^6	0.0026	0.04	0.0048
20	0.043	3.37	8.77×10^5	0.0055	0.04	0.0103
21	0.019	1.46	3.80×10^5	0.0126	0.04	0.0238
22	0.007	0.53	1.38×10^5	0.0349	0.04	0.0657
23	0.001	0.10	2.56×10^4	0.1872	0.04	0.3525

Σχήμα 2.8: Υπολογισμός \dot{Q}_A/\dot{Q}_D , Re, Pe, St και α για διαφορετικές γενιές. (Tsuda A, Henry FS, Butler JP. 2008)



Σχήμα 2.9: Στιγμαίαιες γραμμές ροής σε θέση μέγιστης εισπνοής σε διαστελλόμενους κυψελιδικούς αγωγούς ίδιου σχήματος, για τρεις διαφορετικές τιμές λόγου (Q_A/Q_D). (Tsuda, A., Henry, F.S., Butler, J.P., 1995)



Σχήμα 2.10: Στιγμαίαιες γραμμές ροής σε θέση μέγιστης εισπνοής σε διαστελλόμενους κυψελιδικούς αγωγούς με σταθερό Re , σε τρία διαφορετικά βάθη. (Tsuda, A., Henry, F.S., Butler, J.P., 1995)

Ακόμη ένας μηχανισμός που υποβοηθά τη χαοτική ανάμιξη είναι η συστολή και διαστολή των τοιχωμάτων των κυψελίδων κατά τη διάρκεια της αναπνοής.

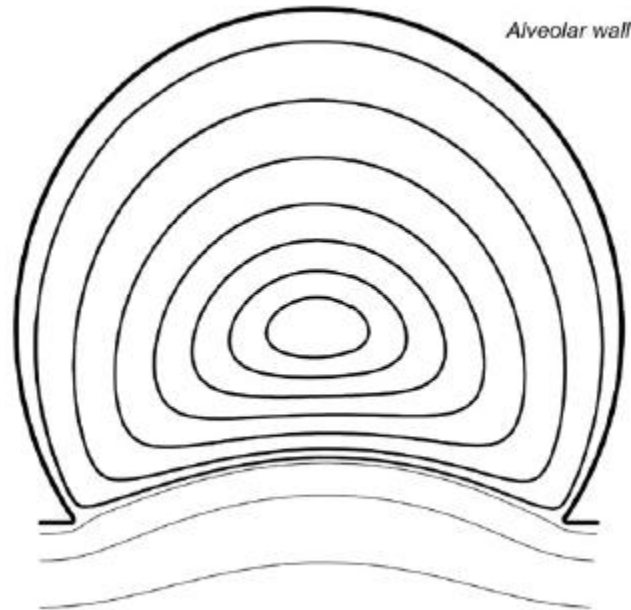
Αυτό, δημιουργεί αξονική ροή προς το εσωτερικό των κυψελίδων. Ο συνδυασμός, λοιπόν, ανακυκλοφορίας και αξονικής ροής στις κυψελίδες, έχει ως αποτέλεσμα αρκετά περίπλοκες πεπλεγμένες τροχιές κίνησης των σωματιδίων, που δημιουργούν τη χαοτική ανάμιξη (Hamiltonian Chaos).

Το 2011, οι Tsuda, Laine-Pearson και Hydon προσπάθησαν να εξηγήσουν με απλούστερο, φυσικό τρόπο τα μαθηματικά μοντέλα και τους μηχανισμούς που διέπουν τη χαοτική ανάμιξη, έτσι ώστε η όλη γνώση να γίνει προσβάσιμη και σε πιο ευρύ, μη-μαθηματικό κοινό. Στο άρθρο τους, επικεντρώνονται σε σωματίδια τα οποία παρασύρονται παθητικά με τη ροή, αγνοώντας οποιαδήποτε επίδραση διάχυσης και αδρανειακής πρόσκρουσης. Η ροή θεωρείται ασυμπίεστη, μιας και η μέγιστη ταχύτητα ροής στις κυψελίδες είναι πολύ μικρότερη από την ταχύτητα του αέρα. Ήδη από το 1995 (Tsuda et al.), με βάση έναν αξονοσυμμετρικό κυψελιδικό αγωγό, μελετήθηκε η επίδραση της κίνησης των τοιχωμάτων των κυψελίδων κατά τη διάρκεια της αναπνοής (cyclic wall motion) στη μη αντιστρεπτή ροή στις κυψελίδες. Παρατηρήθηκε, ότι για χαμηλούς αριθμούς Reynolds, οι κυψελίδες που βρίσκονται αρκετά βαθιά στον πνεύμονα για να συμβεί ανακυκλοφορία, παρουσιάζουν χαρακτηριστικά χαοτικής ανάμιξης.

Στις περιοχές αυτές, όπως αναφέραμε και παραπάνω, οι τροχιές των σωματιδίων είναι περίπλοκες και συχνά περιπλέκονται. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα, εάν θεωρήσουμε ένα στρώμα από τέτοια, συγκεντρωμένα σωματίδια, αυτό ξεδιπλώνεται και αναδιπλώνεται ταχέως όπως ακριβώς η ζύμη («rapidly stretches and folds any sheet of particles»). Έτσι, οι τροχιές γειτονικών σωματιδίων αποκλίνουν γρήγορα, ενθαρρύνοντας την υπόθεση της χαοτικής ροής.

Για την κατανόηση του φαινομένου, εισάγονται δύο συχνότητες, f_1 και f_2 οι οποίες συνδέονται με την διατμητική ροή που δημιουργείται λόγω ανακυκλοφορίας και τη συστοδιαστολή των κυψελίδων που δημιουργούν την αξονική ροή αντίστοιχα. Η f_1 ονομάζεται συχνότητα ανακυκλοφορίας (recirculation frequency). Εν απουσία κίνησης του τοιχώματος, τα σωματίδια διαγράφουν κύκλους σε κλειστές τροχιές, που καλούνται τροχιές ανακυκλοφορίας (recirculation orbits). Η συχνότητα f_1 λοιπόν, αποτελεί τον αριθμό των κύκλων που διαγράφει ένα σωματίδιο ανά μονάδα χρόνου. Γίνεται εύκολα αντιληπτό -και από το σχήμα- ότι η συχνότητα ανακυκλοφορίας λαμβάνει μέγιστη τιμή στο κέντρο της κυψελίδας, όπου η τροχιά

είναι μικρότερη σε μήκος, ενώ μειώνεται όσο προχωράμε προς τα τοιχώματα της κυψελίδας. Η συχνότητα f_2 ονομάζεται συχνότητα αναπνοής (breathing frequency) και επιδρά στην κίνηση των τοιχωμάτων. Αυτές οι δύο συχνότητες επηρεάζουν εν τέλει την χαοτική ανάμιξη, με τρόπο που περιγράφεται παρακάτω.



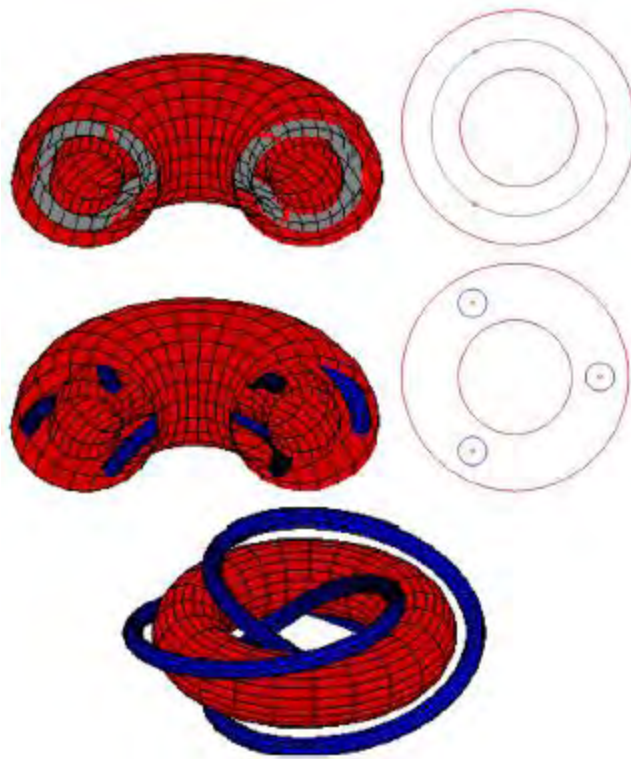
Σχήμα 2.11: Σχηματική αναπαράσταση της ανακυκλοφορίας που δημιουργείται στην κυψελίδα από την εφαπτομενική ροή σε έναν ασύμμετρο κυψελιδικό αγωγό. Υπόθεση μη κινούμενων τοιχωμάτων κυψελίδας. (Tsuda, A., Henry, F.S., Butler, J.P., 1995)

Αρχικά, η κίνηση των σωματιδίων και το εάν ακολουθήσει ή όχι χαοτική ροή εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από το λόγο f_1/f_2 . Σε συγκεκριμένες αναλογίες, όταν τα f_1 και f_2 είναι σημαντικά, δημιουργείται χαοτική ανάμιξη (Hamiltonian Chaos). Όταν ο αριθμός Reynolds είναι μηδέν και τα τοιχώματα ακίνητα, τότε τα παθητικά σωματίδια εντός των κυψελίδων απλώς ανακυκλοφορούν, μετακινούμενα μπρος και πίσω σε κλειστές τροχιές επ'άπειρον. Όμως, η κίνηση του τοιχώματος, η αδράνεια ροής αέρα και η γεωμετρική υστέρηση στη φυσιολογία του αναπνευστικού συστήματος, διαταράσσουν την κίνηση των σωματιδίων με τέτοιο τρόπο, ώστε να εξαρτώνται αποκλειστικά από τη συχνότητα αναπνοής, f_2 .

Για την περιγραφή της περίπλοκης αυτής εξάρτησης της χαοτικής ροής από τα f_1 και f_2 , γίνεται αναπαράσταση της κίνησης των σωματιδίων ως τροχιές πάνω σε τόρο (torus), δηλαδή ένα στερεό εκ περιστροφής που παράγεται από την περιστροφή ενός κύκλου στον τρισδιάστατο χώρο γύρω από έναν άξονα συνεπίπεδο με τον κύκλο. Με χρήση αυτού του γεωμετρικού σχήματος, λοιπόν, γίνεται η αναπαράσταση της μη-διαταραγμένης καθώς και της διαταραγμένης κίνησης των σωματιδίων. Όσον αφορά τη μη διαταραγμένη κίνηση, γίνεται διαχωρισμός σε δύο χαρακτηριστικές κατηγορίες, με βάση εάν ο λόγος των συχνοτήτων f_1/f_2 είναι «λογικός» (rational) ή «μη λογικός» (irrational) αριθμός. Ως λογικός θεωρείται ο λόγος όπου αριθμητής και παρονομαστής αποτελούνται από ακέραιους αριθμούς p, q αντίστοιχα και σε αυτή την περίπτωση τα σωματίδια επιστρέφουν στην αρχική τους θέση. Ως μη λογικός θεωρείται ο λόγος που δεν μπορεί να εκφραστεί από ακέραιους αριθμούς, και στην περίπτωση αυτή τα σωματίδια δεν επιστρέφουν ποτέ στην αρχική τους θέση. Οι μη λογικοί λόγοι μπορούν να χωριστούν σε «επαρκώς μη λογικούς» και «ανεπαρκώς μη λογικούς». Ο λόγος f_1/f_2 , συνεχώς διαφέρει σε κάθε σμήνος από σωματίδια, με αποτέλεσμα κάθε ομάδα τώρων να περιέχει τόσο «λογικούς», όσο και «μη λογικούς» τώρους.

Συνοψίζοντας, κάθε τροχιά κίνησης ενός σωματιδίου αναπαρίσταται από ένα τόρο, είτε λογικό είτε μη λογικό, ανάλογα από τον λόγο f_1/f_2 . Καθώς τα σωματίδια συγκεντρώνονται σε σμήνη, επομένως και οι τόροι, κάθε σμήνος περιέχει και λογικούς και μη λογικούς τώρους. Ένα παράδειγμα από τρεις συγκεντρωμένους τώρους φαίνεται στη φωτογραφία, όπου αποτελείται από έναν εσωτερικό και εξωτερικό μη λογικό τόρο και από έναν μεσαίο λογικό. Η ταχύτητα των σωματιδίων είναι μεγαλύτερη στον εσωτερικό μη λογικό τόρο, μικρότερη στον μεσαίο λογικό και ακόμα πιο μικρή στον εξωτερικό μη λογικό τόρο.

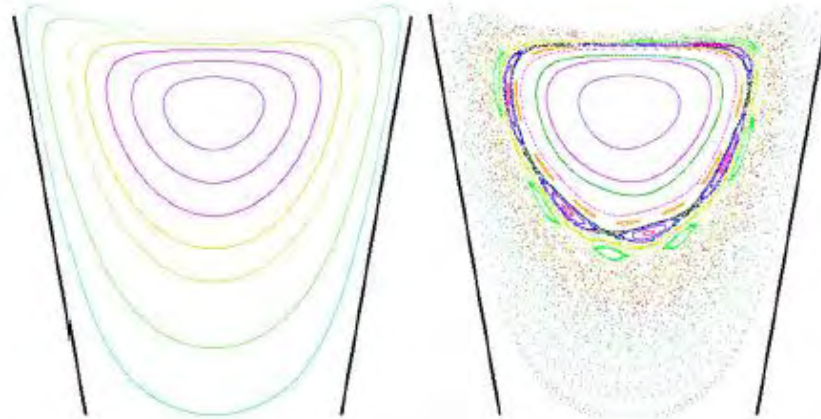
Μέχρι τώρα έγινε λόγος για μη διαταραγμένη κίνηση σωματιδίων. Εάν υπάρξει έστω και απειροελάχιστη διαταραχή (κίνηση τοιχωμάτων, αδράνεια ροής αέρα, γεωμετρική υστέρηση), οι λογικοί καθώς και οι ανεπαρκώς μη λογικοί τόροι «σπάνε» σε χάος, αφού δε μπορούν να επιβιώσουν της διαταραχής. Μόνο οι επαρκώς μη λογικοί τόροι διατηρούν το σχήμα τους. Το χάος που δημιουργείται δημιουργεί περίπλοκες και πεπλεγμένες τροχιές, όπως έχει αναφερθεί.



Σχήμα 2.12: Πάνω: Τρεις τόροι χωρίς διαταραχή, με κόκκινο χρώμα ο εξωτερικός και εσωτερικός (μη λογικοί) και με γκρί ο μεσαίος (λογικός). Μέση: Οι τρεις τόροι μετά τη διαταραχή, ο λογικός τόρος έχει αντικατασταθεί με μπλέ σωληνοειδή στερεό. Κάτω: Αφαιρώντας τον εξωτερικό τόρο, διακρίνεται η δομή του σωληνοειδούς στερεού. (Tsuda, Laine-Pearson, Hydon, 2011)

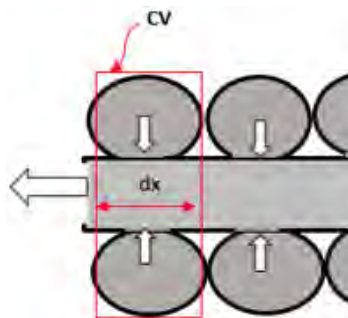
Μία καλύτερη αναπαράσταση της τροχιάς των σωματιδίων, αποτελούν τα τμήματα Poincare (Poincare sections). Ουσιαστικά, πρόκειται για απεικόνιση του ίχνους της θέσης ενός ή περισσότερων σωματιδίων στη διατομή της κυψελίδας, καταγεγραμμένο συνήθως στην αρχή της εισπνοής. Το διάγραμμα Poincare, που γίνεται κάνοντας plot τα διάφορα σημεία της τροχιάς, έχει μεγάλες ποσοτικές αλλαγές ακόμα και για απειροελάχιστες διαταραχές. Για τις λογικούς λόγους f_1/f_2 , η τροχιά στο διάγραμμα Poincare εμφανίζεται ως ομάδα περιοδικών σημείων που εξαρτώνται από την αρχική θέση. Αντιθέτως, για τους μη λογικούς λόγους, το διάγραμμα αποτελείται από άπειρα μη-περιοδικά σημεία για οποιοδήποτε αρχικό σημείο. Παρακάτω, παρατίθενται δύο διαγράμματα Poincare, πριν τη διαταραχή και μετά. Είναι χαρακτηριστικό η δημιουργία νήσων (islands), που υποδηλώνουν το χάος. Το μέγεθος τροχιάς που φτιάχνουν τα νησιά είναι ανάλογο του αριθμού Reynolds (Re) καθώς και του αριθμού Womersley (α). Το διάγραμμα αφορά ροή Stokes στην κοιλότητα της κυψελίδας και κάθε χρώμα αντιπροσωπεύει διαφορετική σωματιδιακή τροχιά. Το αριστερό σχήμα αφορά τροχιές σωματιδίων με ακίνητα τοιχώματα, ενώ το δεξί διάγραμμα επιδεικνύει την αλλαγή στις τροχιές των σωματιδίων όταν τα τοιχώματα κινούνται ελαφρώς.

Συμπερασματικά, κάθε σωματίδιο επιδεικνύει εναλλάξ χαοτική και κανονική κίνηση. Αυτού του είδους η χαοτική ανάμιξη είναι πολύ πιο αποδοτική γιατί επιτρέπει στα σωματίδια να κινούνται αποδοτικά σε ολόκληρη την κυψελίδα.



Σχήμα 2.13: Αριστερά οι τροχιές των σωματιδίων εν απουσία κίνησης τοιχώματος. Δεξιά: Η προσθήκη διαταραχής δημιουργεί νήσους σε μία "θάλασσα χάους" καθώς προστίθενται οκτώ επιπλέον διαδρομές σωματιδίων λόγω διαταραχής. (Tsuda, Laine-Pearson, Hydon, 2011)

Ως αποτέλεσμα της χαοτικής ανάμιξης, θεωρείται ότι οι κυψελίδες συμπεριφέρονται ως δοχεία πλήρους ανάμιξης. Αυτό σημαίνει, ότι η συγκέντρωση του αερολύματος στο εσωτερικό κάθε κυψελίδας είναι σταθερή σε όλη την έκτασή της. Δηλαδή, η χωρική παράγωγος της συγκέντρωσης ($\frac{\partial c}{\partial x}$) σε κάθε σημείο της κυψελίδας ισούται με μηδέν. Εξάιρεση αποτελεί το οριακό στρώμα κοντά στο τοίχωμα της κυψελίδας, όπου εκεί υπάρχει κλίση της συγκέντρωσης, με τη συγκέντρωση να είναι μηδέν επάνω στο τοίχωμα. Στο μοντέλο της παρούσας διπλωματικής, θεωρούμε ότι σε κάθε γενιά, κατά μήκος του αεραγωγού σχηματίζονται δακτύλιοι με κυψελίδες, καθένας από τους οποίους έχει διαφορετική συγκέντρωση αερολύματος (Σχήμα 2.14). Έτσι, σε καθεμία από τις κυψελίδες που αποτελούν έναν δακτύλιο, η συγκέντρωση θεωρείται ίση και σταθερή χωρικά, ενώ η συγκέντρωση σε κάθε δακτύλιο κατά μήκος του αγωγού μεταβάλλεται.



Σχήμα 2.14: Παρουσιάζεται σε πλάγια όψη ο δακτύλιος που θεωρείται όγκος ελέγχου.

2.4 Πολυπλοκότητα προβλήματος

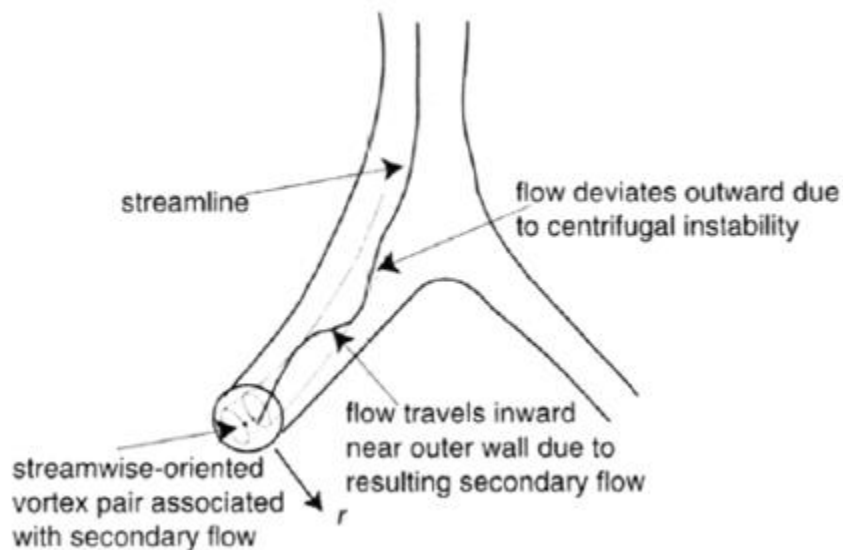
Από μηχανικής απόψεως , η γεωμετρία του αναπνευστικού συστήματος δεν είναι ακόμη απόλυτα κατανοητή. Υπάρχουν αρκετοί λόγοι για τους οποίους συμβαίνει αυτό, οι οποίοι θα αναλυθούν παρακάτω, ενώ θα γίνει και μία παρουσίαση ενός απλουστευμένου μοντέλου για την περίπλοκη αυτή γεωμετρία.

Η πολυπλοκότητα της γεωμετρίας έγκειται στο γεγονός ότι στον πνεύμονα υπάρχει πολύ μεγάλη λεπτομέρεια που δεν μπορεί να αποδοθεί με ακριβή τρόπο. Όπως αναφέρθηκε και σε προηγούμενο κεφάλαιο, υπάρχουν γύρω στις 300 εκατομμύρια κυψελίδες στον πνεύμονα με διάμετρο της τάξης των 300μm, καθεμία με ελαφρώς διαφορετικό σχήμα (Finlay,W.H., 2001).

Ακόμη, σημαντικό παράγοντα αποτελεί το γεγονός ότι η πραγματική γεωμετρία του αναπνευστικού συστήματος μεταβάλλεται χρονικά λόγω και της φυσιολογίας της αναπνοής (time-dependent). Αρχικά, οι κυψελίδες σε κάθε κύκλο συστέλλονται και διαστέλλονται αναλόγως, μη έχοντας έτσι σταθερή διατομή. Σταθερή διατομή δεν έχουν ούτε οι αεραγωγοί της κάθε γενιάς όμως, καθώς ακολουθούν την ίδια πορεία με τις κυψελίδες. Παρ' όλα αυτά, για την παρούσα εργασία, και για λόγους απλούστευσης, οι διατομές των αεραγωγών θα θεωρηθούν σταθερές. Τέλος, εμπόδιο στην κατανόηση της γεωμετρίας αποτελεί το γεγονός ότι αυτή διαφέρει από άτομο σε άτομο, καθώς τα χαρακτηριστικά του πνεύμονα , όπως περιγράφηκε, εξαρτώνται απο αρκετούς ατομικούς παράγοντες.

Υπάρχουν, ακόμη, αρκετοί παράγοντες που επηρεάζουν τη ρευστοδυναμική των σωματιδίων σε αεραγωγούς και κυψελίδες. Στην περιοχή της τραχείας και των κυρίων βρόγχων βρίσκονται αρκετοί δακτύλιοι χόνδρου (cartilaginous rings), οι οποίοι προσδίδουν μια κυματοειδή μορφή στην εσωτερική επιφάνεια των αεραγωγών. Το γεγονός αυτό μπορεί να επηρεάσει σε σημαντικό βαθμό την ρευστοδυναμική και την εναπόθεση των σωματιδίων σε αυτές τις γενιές (Martonen et al. 1994). Επιπλέον, οι βλεφαρίδες (cilia) που βρίσκονται στην τραχειοβρογχική περιοχή (και αναλύθηκαν σε προηγούμενο κεφάλαιο) επηρεάζουν μέσω της λειτουργίας και της συγχρονισμένης κίνησής τους την ρευστοδυναμική στις περιοχές αυτές.

Επίσης, στις πρώτες γενιές των αεραγωγών η ροή δεν είναι ακριβώς στρωτή, αλλά περιέχει στροβιλισμούς (swirlings). Αυτό συμβαίνει καθώς, πέραν της κύριας, αναπτύσσονται και άλλες δευτερεύουσες ροές (secondary flow patterns). Αυτές οφείλονται κυρίως στην καμπυλότητα των διακλαδώσεων των αεραγωγών, και επηρεάζουν αρκετά τις ροϊκές γραμμές, καθώς η ροή παύει να είναι καθαρά αξονική. Αν και οι δευτερεύουσες ροές παραμένουν θέμα υπό έρευνα, εν τούτοις θεωρούνται περισσότερο ισχυρές στις αρχικές γενιές και αρκετά αμελητέες βαθύτερα στον πνεύμονα.



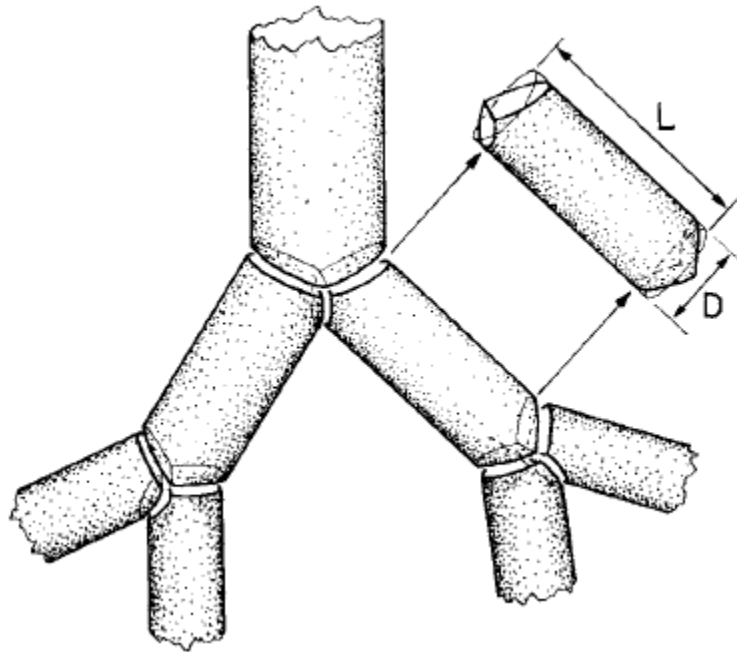
Σχήμα 2.15: Σχηματική αναπαράσταση των δευτερευόντων ροών που αναπτύσσονται σε μία διακλάδωση αεραγωγού του πνεύμονα κατά την εισπνοή. (Finlay W.H., 2001)

Παρόλες τις δυσκολίες, υπάρχουν αρκετές βασικές γνώσεις γύρω από τη γεωμετρία του αναπνευστικού συστήματος που μας επιτρέπουν την ανάπτυξη απλουστευμένων μοντέλων με σκοπό τη μελέτη του πνεύμονα. Ένα τέτοιο μοντέλο, που θα παρουσιαστεί λεπτομερώς παρακάτω, είναι το μοντέλο A του Weibel (Weibel E., 1963) που θα θεωρήσουμε και στην παρούσα εργασία. Πιο συγκεκριμένα, θεωρούμε ότι οι πνεύμονες, ξεκινώντας από την τραχεία, αποτελούνται από μία σειρά διακλαδώσεων (θυγατρικοί αεραγωγοί – daughter airways), οι οποίοι αποτελούν την κάθε γενιά του πνεύμονα. Κάθε θυγατρικός αεραγωγός έχει μικρότερο διάμετρο από εκείνους της προηγούμενης γενιάς, έως ότου τελικά καταλήξουμε στις κυψελίδες.

3. Μοντελοποίηση προβλήματος

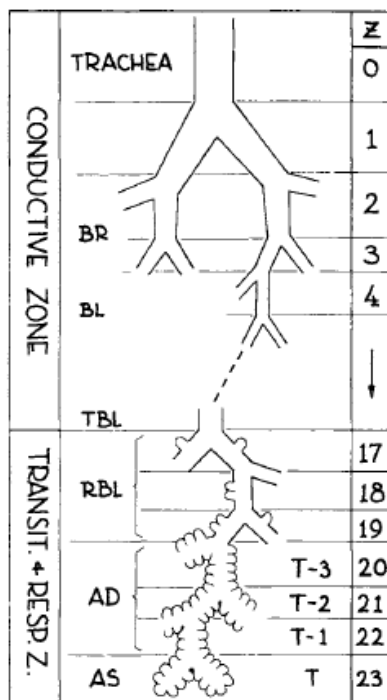
3.1 Το μοντέλο A του Weibel

Ένα από τα σημαντικότερα μοντέλα που χρησιμοποιείται για την μοντελοποίηση του αναπνευστικού συστήματος είναι το **συμμετρικό μοντέλο του Weibel** ή **μοντέλο A του Weibel** (Ewald R. Weibel 1963). Το μοντέλο βασίζεται σε ένα μέσο πνεύμονα ενός ενήλικα και σύμφωνα με αυτό, κάθε αεραγωγός διχοτομείται σε δύο θυγατρικούς αεραγωγούς πανομοιότυπους μεταξύ τους, οι οποίοι έχουν μικρότερη διάμετρο από τον αρχικό αεραγωγό που προέκυψαν όπως φαίνεται και από το σχήμα 3.1. Το δίκτυο κυλινδρικών αεραγωγών αποτελείται από $z=23$ γενιές.

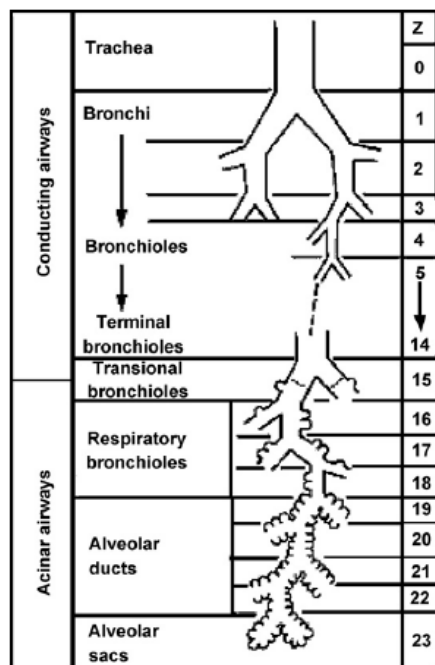


Σχήμα 3.1: Απλοποιημένο διάγραμμα της διχοτόμησης των αεραγωγών (Ewald R. Weibel 1963).

Η αρχή της διαδρομής είναι η τραχεία ($z=0$) και ολοκληρώνεται στους κυψελιδικούς σάκους ($z=23$) όπως φαίνεται και από το σχήμα 3.2. Στο συγκεκριμένο μοντέλο θεωρείται ότι οι γενιές 17 έως 23 περιέχουν κυψελίδες. Οι γενιές που δεν έχουν καθόλου κυψελίδες στα τοιχώματα, αποτελούν την τραχειοβρογχική περιοχή (tracheobronchial region) και οι αεραγωγοί των γενεών αυτών ορίζονται ως “conducting airways” ενώ οι γενιές που έχουν κυψελίδες αποτελούν την κυψελιδική περιοχή (pulmonary region) και για τους αντίστοιχους αεραγωγούς αυτών των γενεών χρησιμοποιείται ο όρος “acinar airways”.



Σχήμα 3.2: Μοντέλο του αναπνευστικού συστήματος στο οποίο οι γενιές 17 έως 23 περιέχουν κυψελίδες (Ewald R. Weibel 1963)



Σχήμα 3.3: Μοντέλο του αναπνευστικού συστήματος στο οποίο οι γενιές 15 έως 23 περιέχουν κυψελίδες (Weibel, Sapovale, & Filoche, 2005)

3.2 Επαναπροσδιορισμός μεγεθών πνεύμονα

Οι Haefeli-Bleuer και Weibel (Haefeli-Bleuer & Weibel, 1988) επανασχεδίασαν το μοντέλο του 1963 (Ewald R. Weibel 1963) θεωρώντας ότι οι τελευταίες 10 γενιές έχουν κυψελίδες (γενιές 13 έως 23). Αργότερα ο Weibel (Weibel, Sapovale, & Filoche, 2005), τροποποιώντας δεδομένα από το 1988 (Haefeli-Bleuer & Weibel, 1988), επανασχεδίασε το μοντέλο με τη διαφορά ότι οι τελευταίες 9 γενιές έχουν κυψελίδες (γενιές 15 έως 23) όπως φαίνεται και στο σχήμα 3.3. Το ποσοστό κάλυψης του τοιχώματος των αεραγωγών της γενιάς z από κυψελίδες εκφράζεται με τον συντελεστή f ο οποίος έχει μηδενικές τιμές για γενιές χωρίς κυψελίδες και φτάνουν μέχρι το ένα, στις τελευταίες γενιές όπου ουσιαστικά δεν υπάρχει τοίχωμα και τα τοιχώματα του αγωγού έχουν καλυφθεί πλήρως από κυψελίδες (Πίνακας 3.1). Είναι σημαντικό να τονιστεί ότι τα δεδομένα από το 1963 αφορούσαν μετρήσεις σε πνεύμονα σε κατάσταση $\frac{3}{4}$ TLC (Συνολική χωρητικότητα), ενώ τα αναθεωρημένα δεδομένα του 2005 αφορούσαν κατάσταση σχεδόν μέγιστης εισπνοής (TLC).

Πίνακας 3.1: Δεδομένα διαστάσεων για πνεύμονα μέσου ενήλικα όπου είναι εκφρασμένα σε κατάσταση TLC (Tsuda A, Henry FS, Butler JP, 2008)

Gen. Z	D (mm)	l (mm)	f
0	18	120	0
1	12.2	47.6	0
2	9.14	20.9	0
3	6.17	8.37	0
4	4.96	13.99	0
5	3.86	11.79	0
6	3.08	9.91	0
7	2.53	8.37	0
8	2.05	7.05	0
9	1.70	5.95	0
10	1.43	5.07	0
11	1.16	3.92	0
12	0.94	3.03	0
13	0.76	2.34	0
14	0.62	1.81	0
15	0.50	1.40	0.2
16	0.50	1.33	0.4
17	0.49	1.12	0.7
18	0.40	0.93	1
19	0.38	0.83	1
20	0.36	0.70	1
21	0.34	0.70	1
22	0.31	0.70	1
23	0.29	0.70	1

Παράλληλα, παρατίθενται και οι βιβλιογραφικοί πίνακες από δύο διαφορετικά μοντέλα (Weibel και Finlay) που συνοψίζονται στο πίνακα 3.2, όπου τα δεδομένα έχουν τροποποιηθεί ώστε ο συνολικός όγκος να αντιστοιχεί σε 3l (FRC-Functional Residual Capacity), ενώ ο όγκος κάθε κυψελίδας αντιστοιχεί σε 10^{-5} ml. Οι διακεκομμένες γραμμές στα δύο μοντέλα συμβολίζουν το τέλος της τραχειοβρογχικής περιοχής (14^η γενιά για το μοντέλο του Finlay και 16^η για του Weibel).

Πίνακας 3.2: Δεδομένα διαστάσεων και όγκων για πνεύμονα μέσου ενήλικα (Finlay, Lange, King, & Speert, 2000)

Generation	Finlay <i>et al.</i> model length (cm)	Scaled Weibel A length (cm)	Finlay <i>et al.</i> model diameter (cm)	Scaled Weibel A diameter (cm)	Finlay <i>et al.</i> model cumulative volume (cc)	Scaled Weibel A cumulative volume (cc)
0 (trachea)	12.456	10.26	1.81	1.539	32.05	19.07
1	3.614	4.07	1.414	1.043	43.401	25.64
2	2.862	1.624	1.115	0.71	54.572	28.64
3	2.281	0.65	0.885	0.479	65.786	29.5
4	1.78	1.086	0.706	0.385	76.918	31.7
5	1.126	0.915	0.565	0.299	85.948	33.76
6	0.897	0.769	0.454	0.239	95.237	35.95
7	0.828	0.65	0.364	0.197	106.236	38.39
8	0.745	0.547	0.286	0.159	118.458	41.14
9	0.653	0.462	0.218	0.132	130.922	44.39
10	0.555	0.393	0.162	0.111	142.711	48.26
11	0.454	0.333	0.121	0.093	153.381	53.01
12	0.357	0.282	0.092	0.081	163.119	59.14
13	0.277	0.231	0.073	0.07	172.644	66.26
14	0.219	0.197	0.061	0.063	183.13	77.14
15	0.134	0.171	0.049	0.056	204.967	90.7
16	0.109	0.141	0.048	0.051	239.898	190.26
17	0.091	0.121	0.039	0.046	284.101	139.32
18	0.081	0.1	0.037	0.043	357.893	190.61
19	0.068	0.085	0.035	0.04	474.046	288.17
20	0.068	0.071	0.033	0.038	689.872	512.95
21	0.068	0.06	0.03	0.037	1067.707	925.25
22	0.065	0.05	0.028	0.035	1742.742	1694.17
23	0.073	0.043	0.024	0.035	3000	3000

Στην περίπτωση που θα αναλύσουμε το πρόβλημα με βάση τις διαστάσεις του πίνακα 3.1 θα πρέπει τα μήκη (l_z) και τις διαμέτρους (d_z) να τα μετατρέψουμε με κατάλληλες συσχετίσεις που προκύπτουν από στερεομετρία και παρουσιάζονται παρακάτω :

$$\frac{l_{TLC}}{l_{FRC}} = \left(\frac{TLC}{FRC}\right)^{\frac{1}{3}} = a^{\frac{1}{3}}$$

$$\frac{d_{TLC}}{d_{FRC}} = \left(\frac{TLC}{FRC}\right)^{\frac{1}{3}} = a^{\frac{1}{3}}$$

Έτσι, από τις παραπάνω σχέσεις υπολογίζουμε τα μεγέθη d_{FRC} και l_{FRC} για όλες τις γενιές από 0 έως 23. Όπως αναφέρουν οι Tsuda et al. (Tsuda A, Henry FS, Butler JP, 2008) θεωρούμε ότι ο όγκος του πνεύμονα είναι 4800ml και όταν συστέλλεται προσεγγιστικά ισούται με τα τρία τέταρτα του TLC, άρα $TLC=6400ml$. Επίσης, ο όγκος του πνεύμονα σε ηρεμία (FRC) είναι $FRC=3000ml$.

Στην συγκεκριμένη εργασία σε υπολογιστικό φύλλο excel θα χρησιμοποιήσουμε τον πίνακα 3.2 για το μοντέλο Weibel A στο οποίο θα θεωρήσουμε ότι οι κυψελίδες υπάρχουν από τις γενιές 15 έως 23.

Παράλληλα, γνωρίζουμε εξ'αρχής την στήλη του κλάσματος εναπόθεσης, f , όπως παρουσιάζεται από τον πίνακα 3.1, καθώς επίσης και ότι ο συνολικός αθροιστικός όγκος αεραγωγών και κυψελίδων στην 23^η γενιά (Total Cumulative Volume) πρέπει να ισούται με 3000 ml.

Για τον υπολογισμό του όγκου των αεραγωγών σε κάθε γενιά, χρησιμοποιήθηκε ο τύπος :

$$V_{p,z} = 2^z \left(\frac{\pi d_z^2}{4}\right) l_z$$

Με αυτή τη διαδικασία υπολογίζεται ο συνολικός αθροιστικός όγκος των αεραγωγών και των 23 γενιών από τον τύπο:

$$Sum, V_p = \sum_{z=0}^{23} V_{p,z}$$

Η κάθε κυψελίδα θεωρείται ότι έχει σχεδόν σφαιρικό σχήμα και διάμετρο d_a και υπολογίζουμε τον όγκο της από τη παρακάτω σχέση :

$$V_{1a} = \frac{\pi d_a^3}{6} \quad (3.1)$$

Η περίμετρος των αεραγωγών κάθε γενιάς υπολογίζεται από τον παρακάτω τύπο:

$$S_z = 2^z \pi d_z l_z$$

Ο συνολικός όγκος μιας γενιάς ($V_{t,z}$) είναι ο όγκος των αεραγωγών της γενιάς ($V_{p,z}$) σε συνδυασμό με τον όγκο των κυψελίδων της γενιάς ($V_{a,z}$) όπου υπολογίζεται με βάση τον παρακάτω τύπο :

$$V_{t,z} = V_{p,z} + V_{a,z}$$

Ο συνολικός όγκος των κυψελίδων βρίσκεται από τον παρακάτω τύπο :

$$\sum_{z=15}^{23} V_{a,z} = \text{Sum}, V_{a,z} = \text{FRC} - \text{Sum}, V_p$$

Οι γενιές χωρίς κυψελίδες ($z=0,1,\dots,14$) θα έχουν $V_{a,z}=0$ και $V_{t,z} = V_{p,z}$

Για τις υπόλοιπες γενιές ($z \geq 15$) μπορεί να χρησιμοποιηθεί η παρακάτω εξίσωση για να υπολογιστεί ο όγκος των κυψελίδων:

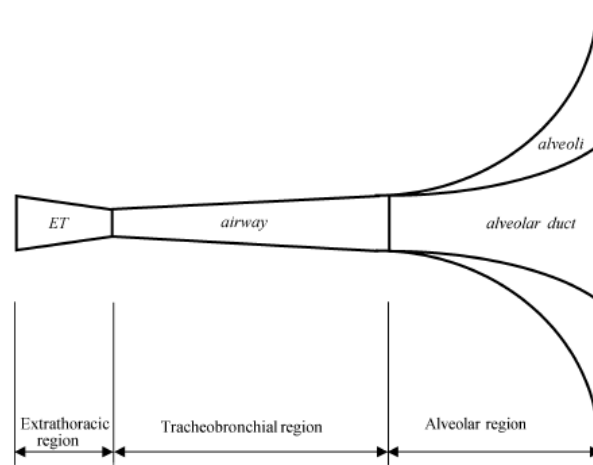
$$\frac{V_{a,z}}{\sum_{z=15}^{23} V_{a,z}} = \frac{f_z S_z}{\sum_{z=15}^{23} f_i S_i} \Rightarrow V_{a,z} = \frac{f_z S_z}{\sum_{z=15}^{23} f_z S_z} \sum_{z=15}^{23} V_{a,z} \quad (3.2)$$

Όπου f_z : Κλάσμα εναπόθεσης γενιάς z

S_z : Περίμετρος αεραγωγού γενιάς z

3.3 Το μονοδιάστατο πρόβλημα - Μοντέλο Τρομπέτας (Trumpet Model)

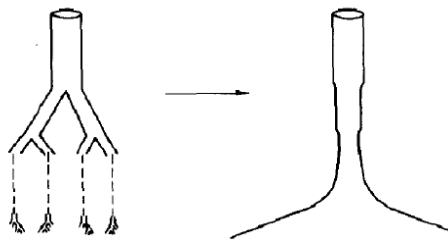
Το σύνθετο μοντέλο του Weibel (μοντέλο A), λόγω της τριδιάστατης μορφής του πνεύμονα, οδηγεί σε μεταβολές των παραμέτρων σε διάφορες κατευθύνσεις με αποτέλεσμα να είναι επιθυμητό να αναχθεί η τριδιάστατη ανάλυση σε μονοδιάστατη. Το Μοντέλο Τρομπέτας (Trumpet Model) ανάγει το πρόβλημα σε μονοδιάστατο και συγκεκριμένα υπάρχει μεταβολή σε μία μόνο χωρική διάσταση, το βάθος, όπως φαίνεται και στο σχήμα 3.4.



Σχήμα 3.4: Αναγωγή του τρισδιάστατου προβλήματος σε μονοδιάστατο σύμφωνα με το Μοντέλο της Τρομπέτας (Choi, J.I., & Kim, C.S., 2007)

Όπως αναφέραμε αρχικά στο εισαγωγικό μέρος, το βάθος μετριέται από την αρχή της τραχείας ($x=0$), όπου με χρήση της συμμετρίας του μοντέλου A του Weibel μπορούμε να πούμε πως κάθε σημείο του “δέντρου” των αεραγωγών (airways) μπορεί να χαρακτηριστεί από αυτή την απόσταση x .

Επομένως, αντί για την γενιά z να έχουμε 2^z αεραγωγούς με διάμετρο d_z , έχουμε έναν αεραγωγό με διατομή την συνολική: $A_z = 2^z * \frac{\pi * d_z^2}{4}$, με την τελική μετατροπή να παρουσιάζεται καλύτερα στο παρακάτω σχήμα 3.5.



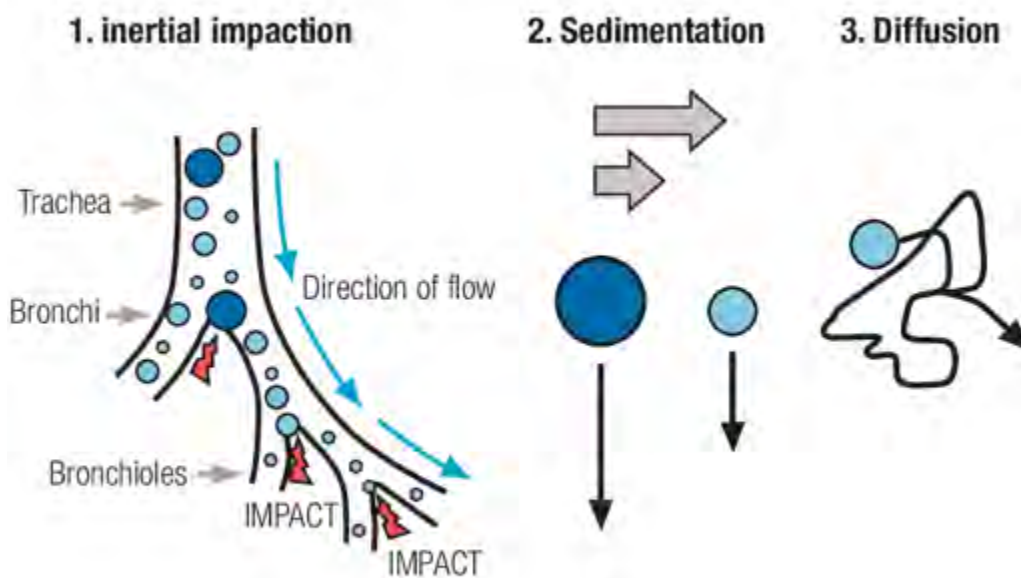
Σχήμα 3.5: Το Μοντέλο τρομπέτας όπου παρουσιάζει την μετατροπή των 2^z αεραγωγών σε έναν με συνολική διατομή A_z (Egan MJ & Nixon, 1985)

3.4 Μηχανισμοί Εναπόθεσης

Οι βασικότεροι μηχανισμοί μεταφοράς και εναπόθεσης των σωματιδίων στα τοιχώματα των αεραγωγών είναι (Finlay W.H.2001): **Αδρανειακή πρόσκρουση (Inertial Impaction)**, **Βαρυτική καθίζηση (Gravitational Settling)** και **Διάχυση Brownian (Brownian-Diffusion)**. Οι παραπάνω μηχανισμοί υποθέτουν ότι τα σωματίδια που έρχονται σε επαφή με το τοίχωμα εναποτίθενται σίγουρα και επομένως δεν υπάρχει κάποιο ποσοστό σωματιδίων που να αποκολληθεί και να επιστρέψει πίσω στη ροή. Οι παραπάνω μηχανισμοί που αναφέραμε παρουσιάζονται παρακάτω στο σχήμα 3.6.

Στα παρακάτω υποκεφάλαια θα εξετάσουμε ξεχωριστά τον καθένα μηχανισμό και θα αναφερθούμε στους αδιάστατους αριθμούς που χρησιμοποιούν. Επίσης, θα αναφερθούμε στους χαρακτηριστικούς χρόνους των σωματιδίων οι οποίοι είναι οι εξής:

- Ο χρόνος που το σωματίδιο ταξιδεύει μέσα στους αεραγωγούς
- Ο χρόνος που χρειάζεται για να εναποτεθεί ανάλογα με τον κάθε μηχανισμό



Σχήμα 3.6: Μηχανισμοί μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων

Σύμφωνα με τον Heyder (Heyder J., 2004) σωματίδια με διαμέτρους **μικρότερες του 0.1 μm** εναποτίθενται κυρίως με διάχυση Brown, σωματίδια με διαμέτρους **από 0.1 έως 1 μm** εναποτίθενται με διάχυση Brown και βαρυτική καθίζηση και σωματίδια με διαμέτρους **μεγαλύτερες από 1 μm** εναποτίθενται με βαρυτική καθίζηση και αδρανειακή πρόσκρουση.

3.4.1 Πιθανότητες εναπόθεσης σωματιδίων

Ορίζουμε τα παρακάτω σύμβολα πιθανοτήτων :

$P_{i,z}$: Η πιθανότητα εναπόθεσης σωματιδίων γενιάς z με αδρανειακή πρόσκρουση (inertial impaction).

$P_{s,z}$: Η πιθανότητα εναπόθεσης σωματιδίων γενιάς z με βαρυτική καθίζηση (gravitational settling).

$P_{d,z}$: Η πιθανότητα εναπόθεσης σωματιδίων γενιάς z με διάχυση Brownian (Brownian diffusion).

$P_{t,z}$: Η συνολική πιθανότητα εναπόθεσης σωματιδίων γενιάς z και με τους τρεις παραπάνω μηχανισμούς.

$P_{no\ deposition}$: Η πιθανότητα να μην υπάρχει εναπόθεση σωματιδίων με τους τρεις παραπάνω μηχανισμούς.

Με την θεώρηση ότι τα ενδεχόμενα να μην έχουμε εναπόθεση με τους τρεις μηχανισμούς είναι ανεξάρτητα μπορούμε να πούμε ότι :

$$\begin{aligned} P_{no\ deposition} &= 1 - P_{t,z} = P((\text{no impaction}) \cap (\text{no settling}) \cap (\text{no diffusion})) = \\ &= (1 - P_{i,z})(1 - P_{i,s}P_{i,s})(1 - P_{i,d}) \\ \Rightarrow P_{t,z} &= P_{i,z} + P_{s,z} + P_{d,z} - P_{i,z}P_{g,z} - P_{i,z}P_{d,z} - P_{s,z}P_{d,z} + P_{i,z}P_{s,z}P_{d,z} \end{aligned}$$

Η συνολική πιθανότητα μπορεί να υπολογιστεί και από τον παρακάτω τύπο:

$$P_{t,z} = (P_{i,z} + P_{s,z} + P_{d,z})^{1/n}$$

Όπου οι τιμές του n παίρνουν διαφορετικές τιμές σύμφωνα με διάφορους συγγραφείς. Για παράδειγμα οι Asgharian και Anjilvel (1994) προτείνουν $n=3$ για ευθείους αεραγωγούς, αλλά $n=1.4$ για αεραγωγούς με διακλαδώσεις. Από την ICRP (International Commission on Radiological Protection) προτείνεται η τιμή $n=2$ (ICRP, 1994).

Αν υπάρχουν μόνο οι μηχανισμοί της διάχυσης και της βαρυτικής καθίζησης προτείνεται ο παρακάτω τύπος συνολικής πιθανότητας (Heyder, Gebhart, & Scheuch, 1985) :

$$P_{t,z} = P_{d,z} + P_{s,z} - \frac{P_{d,z}P_{s,z}}{P_{d,z} + P_{s,z}}$$

Αν αγνοηθεί ο μηχανισμός της διάχυσης προτείνεται ο παρακάτω τύπος συνολικής πιθανότητας (Balásházy, Martonen, & Hofmann, 1990):

$$P_{t,z} = P_{i,z} + P_{s,z} - P_{i,z}P_{s,z}$$

3.4.2 Βασικοί συντελεστές και σύμβολα των μηχανισμών εναπόθεσης

Τα σωματίδια που εισέρχονται στους αεραγωγούς κινούνται σχετικά ως προς το ρευστό που είναι ο αέρας και ασκεί μια οπισθέλκουσα δύναμη στα σωματίδια. Η οπισθέλκουσα δύναμη μπορεί να παρασθεί ως:

$$F_D = C_D A_p \rho_f u_r^2 / 2$$

όπου C_D είναι ο συντελεστής οπισθέλκουσας, A_p η προβαλλόμενη επιφάνεια του σωματιδίου, ρ_f η πυκνότητα του ρευστού και u_r η σχετική ταχύτητα του σωματιδίου ως προς το ρευστό. Ο συντελεστής οπισθέλκουσας πρέπει να προσδιοριστεί πειραματικά διότι εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από το σχήμα του σωματιδίου και από τον τύπο ροής που χαρακτηρίζεται με βάση τον αριθμό Reynolds.

Ο αριθμός Reynolds ορίζεται ως

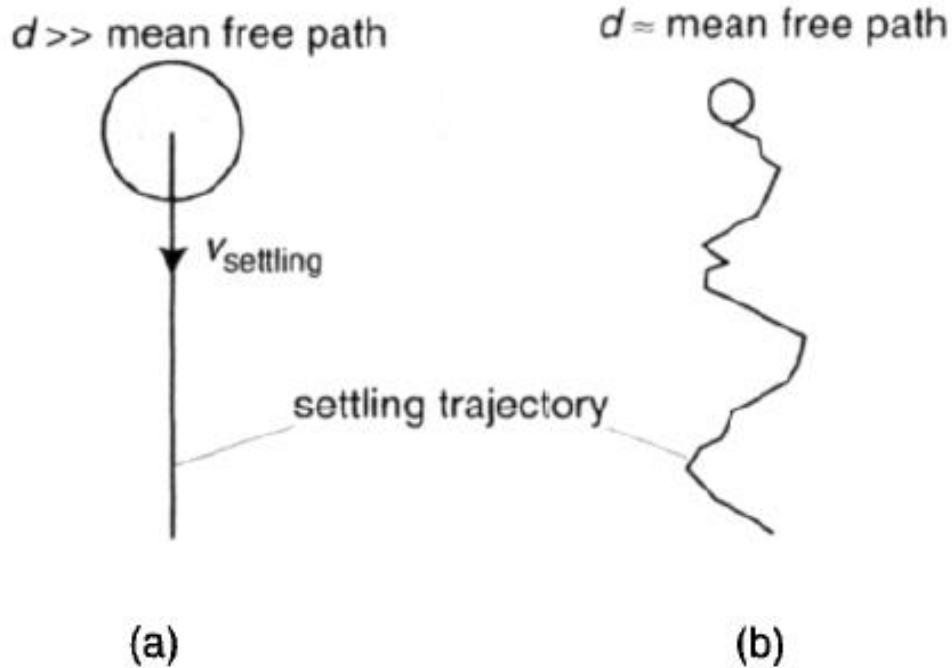
$$Re = \frac{d_p u_r \rho_f}{\mu_f}$$

όπου d_p η διάμετρος του σωματιδίου και μ_f το δυναμικό ιξώδες του ρευστού.

Θεωρώντας τα σωματίδια ως άκαμπτες σφαίρες και για αριθμούς Reynolds μικρότερους από 1, η αναλυτική ολοκλήρωση των εξισώσεων της κίνησης καταλήγει στο νόμο του Stokes (Finlay W. H., 2001):

$$F_D = 3\pi\mu_f d_p u_r \quad \text{και} \quad C_D = 24/Re$$

Υπάρχει ένα κάτω όριο για το μέγεθος σωματιδίου στον νόμο του Stokes. Όταν η διάμετρος του σωματιδίου d_p είναι μεγάλη σε σχέση με τη μέση ελεύθερη διαδρομή λ του αερίου (σχήμα 3.7a), το ρευστό μπορεί να μοντελοποιηθεί ως συνεχές μέσο. Διαφορετικά, όταν η διάμετρος του σωματιδίου είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με το λ το ρευστό λαμβάνεται υπόψιν ως διακριτά μόρια (σχήμα 3.7b).



Σχήμα 3.7: Μοντελοποίηση του ρευστού ανάλογα με μέγεθος της διαμέτρου του σωματιδίου σε σχέση με τη μέση ελεύθερη διαδρομή (Finaly W.H., 2001).

Σαν αποτέλεσμα στη δεύτερη περίπτωση, το σωματίδιο είναι ικανό να ολισθαίνει ανάμεσα στα μόρια του ρευστού με αποτέλεσμα να μειώνει την ενεργή οπισθέλκουσα πάνω στα σωματίδια που προβλέπει ο νόμος του Stokes. Ο συντελεστής διόρθωσης-ολίσθησης του Cunningham όπως αναφέρεται από τους Wark & Warner (Wark & Warner, 1981) διορθώνει το συντελεστή οπισθέλκουσας του Stokes και προκύπτει για το συντελεστή ο τύπος:

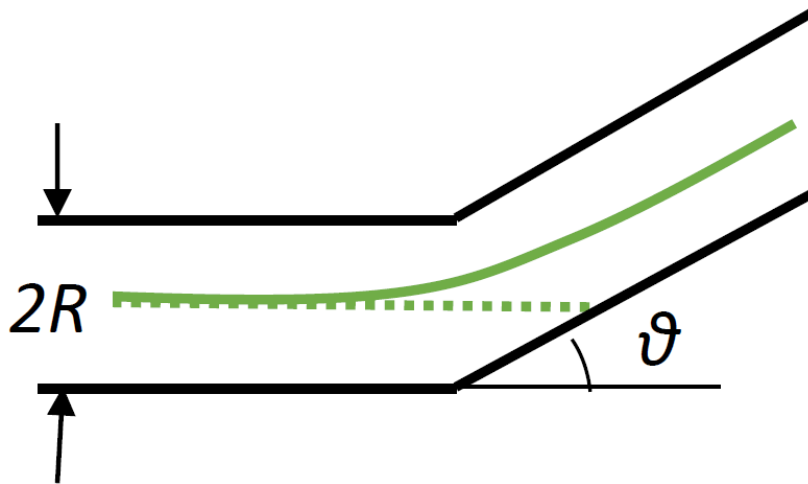
$$C = 1 + 2 \cdot \frac{\lambda}{d_p} [1.257 + 0.4 \exp(-0.55 d_p / \lambda)]$$

όπου λ η μέση ελεύθερη διαδρομή και σύμφωνα με την κινητική θεωρία των αερίων υπολογίζεται από τον τύπο :

$$\lambda = \frac{\mu}{0,499P \sqrt{8 MW / \pi RT}}$$

3.4.3 Αδρανεϊακή Πρόσκρουση (Inertial Impaction)

Καθώς το ρευστό ρέει μέσα στους αεραγωγούς, οι ροϊκές γραμμές θα εκτραπούν, ενώ, λόγω αδράνειας τα σωματίδια δεν θα ακολουθήσουν επακριβώς τις ροϊκές γραμμές. Σ' αυτήν την περίπτωση γίνεται πρόσκρουση του σωματιδίου με τα τοιχώματα του αεραγωγού και το φαινόμενο αυτό ονομάζεται **αδρανεϊακή πρόσκρουση (Inertial Impaction)**. Υπάρχουν δύο χαρακτηριστικοί χρόνοι στο συγκεκριμένο πρόβλημα, με τον πρώτο να είναι ο χρόνος που χρειάζεται το σωματίδιο για να συγκρουστεί με τον αεραγωγό διαμέτρου $d_z = 2R$, όπως φαίνεται στο σχήμα 3.8 (collision time), και τον δεύτερο να είναι ο χρόνος που χρειάζεται το σωματίδιο για να προσαρμόσει την ταχύτητά του στην ταχύτητα του ρευστού και ονομάζεται χρόνος χαλάρωσης (relaxation time).



Σχήμα 3.8: Μηχανισμός Αδρανεϊακής Πρόσκρουσης(Inertial Impaction).

Συμβολίζουμε με U_0 τη μέση ταχύτητα του ρευστού στη διατομή του αεραγωγού. Αποδεικνύεται ότι η ταχύτητα με την οποία θα καθιζάνει το σωματίδιο με διάμετρο d_p , πυκνότητα ρ_p , υπό συνθήκες χαμηλού αριθμού Re ($Re < 1$), ονομάζεται ταχύτητα καθίζησης (settling velocity) v_{settling} . Σύμφωνα με τον Finlay (Finlay W. H., 2001) η ταχύτητα καθίζησης υπολογίζεται από τον παρακάτω τύπο:

$$v_{\text{settling}} = \frac{d_p^2 \rho_p C g}{18\mu_f}$$

όπου g η επιτάχυνση της βαρύτητας.

Αν θεωρήσουμε ένα σωματίδιο που τοποθετείται με μηδενική ταχύτητα σε ένα ρευστό με μέση ταχύτητα U_o , εξαιτίας της οπισθέλκουσας δύναμης το σωματίδιο θα αρχίσει να κινείται και θα επιταχύνεται μέχρι η ταχύτητα του να εξισωθεί με εκείνη του ρευστού. Αποδεικνύεται (Finlay W. H., 2001) ότι ο αριθμός St μπορεί να ερμηνευθεί ως ο αδιάστατος χρόνος που χρειάζεται για να μειωθεί η ταχύτητα κατά 37% από την αρχική της τιμή. Επομένως, από τον ορισμό του αριθμού St και την αδιαστατική ανάλυση προκύπτει (Finlay W. H., 2001) ότι ο χρόνος χαλάρωσης σωματιδίου (particle relaxation time) είναι ο διαστατοποιημένος χρόνος που χρειάζεται το σωματίδιο για να μειώσει τη διαφορά της ταχύτητάς του από την ταχύτητα του ρευστού κατά 37%, υπό την επίδραση μόνο της οπισθέλκουσας δύναμης και ισούται με :

$$\tau = \frac{d_p^2 \rho_p C}{18\mu_f} = \frac{v_{\text{settling}}}{g}$$

Ο χρόνος που χρειάζεται το σωματίδιο για να συγκρουστεί με τον αεραγωγό διαμέτρου d_z (collision time) ισούται με :

$$t = d_z / U_o$$

Επομένως το πηλίκο των δύο χαρακτηριστικών χρόνων δημιουργεί έναν αδιάστατο αριθμό ο οποίος είναι :

$$\frac{\text{relaxation time}}{\text{collision time}} = \frac{\frac{d_p^2 \rho_p C}{18\mu_f}}{d_z / U_o} = \frac{d_p^2 \rho_p C U_o}{18\mu_f d_z} = St = \tau U_o / d_z$$

Με χρήση εμπειρικών συναρτήσεων που έχουν προκύψει από πειραματικά δεδομένα έχει προκύψει το συμπέρασμα πως η πιθανότητα εναπόθεσης με αδρανειακή πρόσκρουση μπορεί να γραφεί σαν συνάρτηση μόνο του αριθμού Stokes (Finlay W. H., 2001).

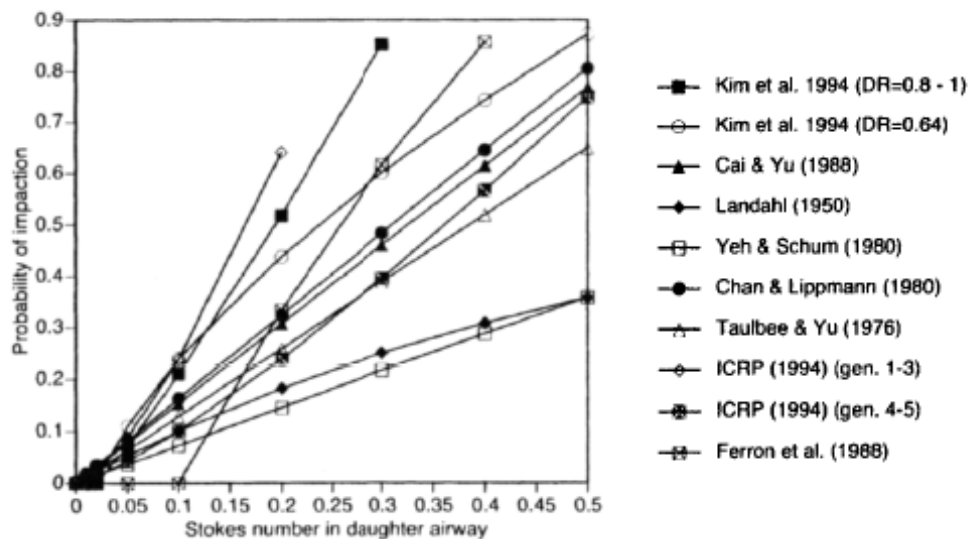
Υπάρχουν διάφορες εμπειρικές σχέσεις για την πιθανότητα εναπόθεσης με αδρανειακή πρόσκρουση στο μοντέλο χρησιμοποιείται η σχέση των Cai & Yu, για τον λόγο ότι η συγκεκριμένη σχέση χρησιμοποιούταν και σε άλλα μοντέλα του εργαστηρίου μας. Αυτή είναι (Cai & Yu, 1988):

$$P_{i,k} = 1.53473St$$

Ο Finlay (Finlay W. H., 2001) συγκέντρωσε στον παρακάτω πίνακα (Πίνακας 3.3) και άλλες σχέσεις για τον υπολογισμό της πιθανότητας εναπόθεσης με αδρανειακή πρόσκρουση.

Πίνακας 3.3: Συσχετίσεις για τον υπολογισμό της πιθανότητας εναπόθεσης με αδρανειακή πρόσκρουση (Finlay W.H.,2001).

Formula	Source
$P_i = 0$ if $Stk < 0.02$, otherwise $= -0.0394 + 3.7417(2 Stk DR^3)^{1.16}$ for $DR = 0.8-1.0$	(7.43) Kim <i>et al.</i> (1994)
$P_i = -0.1299 + 1.5714(2 Stk DR^3)^{0.62}$ for $DR = 0.64$	(7.44) Kim <i>et al.</i> (1994)
$P_i = a Stk$	(7.45) Cai and Yu (1988)
where $a = f(\beta, DR)$ and $a = 1.53473$ for Poiseuille flow and branching angle of $\beta = 35^\circ$, $DR = 0.7853$	
$P_i = b Stk / (1 + b Stk)$	(7.46) Landahl (1950)
where $b = 4DR^3 \sin \beta$ and $b = 1.1111$ for $\beta = 35^\circ$, $DR = 0.7853$	
$P_i = 1 - \frac{2}{\pi} \arccos(\beta Stk) + \frac{1}{\pi} \sin[2 \arccos(\beta Stk)]$	(7.47) Yeh and Schum (1980)
Note: $\beta = 0.568977$ for 32.6° average branching angle	
$P_i = 1.606 Stk + 0.0023$	(7.48) Chan and Lippmann (1980)
$P_i = 1.3(Stk - 0.001)$	(7.49) Taulbee and Yu (1975)
$P_i = 6.4 Stk^{1.43}$ generations 1-3	(7.50) ICRP (1994)
$= 1.78 Stk^{1.25}$ generations 4-5	(7.51)
$P_i = 0$ if $Stk < 0.1$, otherwise $= 4(Stk - 0.1)/(Stk + 1)$	(7.52) Ferron <i>et al.</i> (1988)



3.4.4 Βαρυτική καθίζηση(Gravitational settling)

Η βαρυτική καθίζηση είναι μια διαδικασία η οποία εξαρτάται από τον χρόνο και θεωρούμε ότι καθώς ένα σωματίδιο κινείται μέσα στο ρευστό, η κίνησή του επηρεάζεται από την μοναδική δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο τη βαρύτητα. Επομένως θεωρούμε ότι αυτό θα “καθιζάνει” στο τοίχωμα του αεραγωγού αν ο χρόνος που χρειάζεται για να φύγει (δραπετεύσει) από τον αεραγωγό (traveling time) είναι μεγαλύτερος από τον χρόνο (χρόνος καθίζησης – sedimentation time) που χρειάζεται για να χτυπήσει στο τοίχωμα. Αυτού του είδους τις εναποθέσεις τις ονομάζουμε **εναποθέσεις λόγω βαρυτικής καθίζησης (gravitational settling)**.

Για έναν αεραγωγό διαμέτρου d_z και μήκους l που βρίσκεται υπό κλιση γωνίας φ μπορούμε να υπολογίσουμε τους χαρακτηριστικούς χρόνους που αναφέραμε :

Ο χρόνος που χρειάζεται για να φύγει (δραπετεύσει) από τον αεραγωγό (traveling time) είναι ίσος με l / U_o και ο χρόνος καθίζησης – sedimentation time που χρειάζεται για να χτυπήσει στο τοίχωμα είναι ίσος με $d_z / v_{\text{settling}} \cos(\varphi)$.

Αν διαιρέσουμε τους χαρακτηριστικούς χρόνους που αναφέραμε θα προκύψει ο παρακάτω αδιάστατος αριθμός η :

$$\eta = \frac{l / U_o}{d_z / v_{\text{settling}} \cos(\varphi)} = \frac{\cos(\varphi) l v_{\text{settling}}}{U_o d_z}$$

Η εναπόθεση σωματιδίων με βαρυτική καθίζηση προσδιορίζεται από τον αδιάστατο αριθμό:

$$q = \frac{3}{4} \frac{l v_{\text{settling}}}{U_o d_z} \cos \varphi$$

Τελικά προκύπτει ότι $\eta = (3/4)q$, με $\varphi = 38.24$ έτσι ώστε να έχουμε τη μέση συνεισφορά αγωγών διαφορετικών κλίσεων (Heyder & Gebhart, 1977).

Για να υπολογίσουμε το ποσοστό από τα σωματίδια που εισέρχονται στο αεραγωγό και εναποτίθενται λόγω βαρυτικής καθίζησης υπάρχουν απλοποιημένες μορφές λύσεων πιθανοτήτων εναπόθεσης που προκύπτουν αναλυτικά για περιπτώσεις στρωτής ροής (εμβολική ροή (plug flow) ή ροή Poiseuille) (Finlay W. H., 2001). Οι εξισώσεις που χρησιμοποιούνται είναι οι ακόλουθες:

Για τις πρώτες 5 γενιές :

$$P_{G,z} = 1 - \exp\left(-\frac{16q}{3\pi}\right), \quad 1 \leq z \leq 5$$

Για τις επόμενες γενιές ισχύει :

$$P_{G,z} = \frac{2}{\pi} \left[(2q - q^{1/3}) \sqrt{1 - q^{2/3}} + \arcsin(q^{1/3}) \right], \quad z \geq 6$$

3.4.5 Διάχυση Brownian (Brownian diffusion)

Σωματίδια πολύ μικρού μεγέθους ($d_p \ll 1 \mu\text{m}$) αν έρθουν σε επαφή με ρευστό τυχαίας κίνησης θα αποκτήσουν τροχιά η οποία είναι ακανόνιστη (nondeterministic). Το συγκεκριμένο φαινόμενο ονομάζεται **κίνηση ή διάχυση Brownian**. Αν το σωματίδιο κατά τη διάρκεια της τυχαίας αυτής κίνησης έρθει σε επαφή με το τοίχωμα, εναποτίθεται. Η εναπόθεση με αυτό τον τρόπο ονομάζεται εναπόθεση λόγω κίνησης ή διάχυσης Brown (Brownian motion diffusion).

Αν μελετήσουμε το σωματίδιο για χρόνο πολύ μεγαλύτερο από το χρόνο ανάμεσα σε δύο συγκρούσεις του σωματιδίου, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον τύπο που είχε παρουσιάσει ο Einstein (Einstein, 1905), σύμφωνα με τον οποίο η τετραγωνική ρίζα της μέσης τιμής των τετραγώνων των μετατοπίσεων (root mean square displacement), έπειτα από χρονικό διάστημα t (όπου $t \gg$ time between molecular collisions), λόγω διάχυσης Brown ισούται με:

$$x_D = (2tD_d)^{1/2}$$

όπου D_d είναι ο συντελεστής διάχυσης Brown (Brownian diffusion coefficient) και ισούται με:

$$D_d = \frac{kTC}{3\pi\mu_f d_p}$$

όπου $k = 1.38 \cdot 10^{-23}$ η σταθερά του Boltzman και T η θερμοκρασία σε Kelvin.

Σε αυτό το σημείο είναι σημαντικό να πούμε ότι η διάχυση κατά τη ροή δεν εκφράζεται ολοκληρωτικά μόνο από την διάχυση Brown. Θεωρώντας ότι η κατανομή της ταχύτητας εκφράζεται μόνο από τη μέση ταχύτητα και όχι από το πραγματικό προφίλ της, αυτομάτως αποκλείουμε μία επιπλέον διάχυση στην κατεύθυνση της ροής. Η βασική αιτία του συγκεκριμένου προβλήματος, οφείλεται στο γεγονός ότι το πραγματικό προφίλ υφίσταται επιπλέον διασπορά Taylor (Taylor dispersion) που είναι στη ουσία μία διάχυση λόγω διαφοράς συγκέντρωσης προς την ακτινική διεύθυνση. Επομένως, είναι αναγκαίο να λάβουμε υπόψιν την επιπλέον διασπορά και σαν αποτέλεσμα συμβολίζουμε ως D_F τον συντελεστή της **επιπλέον ή φαινομενικής διαχυτότητας**. Η συνολική διαχυτότητα που είναι στην ουσία το άθροισμα της φαινομενικής διαχυτότητας και της διαχυτότητας λόγω διάχυσης Brown είναι η πραγματική διαχυτότητα που είναι

γνωστή ως **ενεργή διαχυτότητα (effective diffusivity)**. Επομένως, ο συντελεστής της ενεργής διαχυτότητας είναι $D_{eff} = D_F + D_d$.

Υπάρχουν πολλές σχέσεις στη βιβλιογραφία για τον υπολογισμό του συντελεστή της ενεργής διαχυτότητας μερικές από τις οποίες θα αναφέρουμε αμέσως παρακάτω. Σύμφωνα με τους Brenner και Edwards (Brenner & Edwards 1993) και Clussler (Clussler 2009) παραθέτουμε παρακάτω τη σχέση υπολογισμού για το συντελεστή της ενεργής διαχυτότητας συνάρτηση της μέσης ταχύτητας U_o , της διαμέτρου d_z της εκάστοτε γενιάς αεραγωγού και του συντελεστή διάχυσης Brown:

$$D_F = \frac{U_o^2 d_z^2}{192 D_d}$$

Είναι φανερό από τη παραπάνω σχέση ότι για υψηλές τιμές του συντελεστή διάχυσης Brown έχουμε μικρές τιμές του συντελεστή φαινομενικής διαχυτότητας και το αντίστροφο ισχύει για την αντίθεση περίπτωση.

Επίσης, η σχέση των Scherer et al. (Scherer, Shendalman, Greene, & Bouhuys 1975) χρησιμοποιείται συχνά στους υπολογισμούς και εκφράζει τον συντελεστή συναρτήση της μέσης ταχύτητας U_o , της διαμέτρου d_z της εκάστοτε γενιάς αεραγωγού και μίας παραμέτρου a η οποία παίρνει διαφορετικές τιμές για εισπνοή και εκπνοή. Η σχέση που περιγράψαμε είναι η παρακάτω :

$$D_F = a U_o d_z$$

για εισπνοή : $a=1.08$

για εκπνοή : $a=0.37$

Υπάρχουν και άλλες σχέσεις για τον υπολογισμό του συντελεστή της φαινομενικής διαχυτότητας οι οποίες παραλείπονται διότι ξεφεύγουν από το στόχο της παρούσας εργασίας.

Θα ορίσουμε την σταθερά διάχυσης K που προκύπτει από το πηλίκο των παρακάτω δύο χαρακτηριστικών χρόνων. Ο χρόνος που χρειάζεται για να φύγει (δραπετεύσει) από τον αεραγωγό (traveling time) είναι ίσος με l/U_o και ο χρόνος που χρειάζεται το σωματίδιο που εκτελεί τυχαία κίνηση Brown για να έρθει σε επαφή με τον αεραγωγό είναι ο χρόνος διάχυσης (diffusion time) και είναι ίσος με $\frac{d_z^2}{D_d}$. Ο αδιάστατος αριθμός K είναι :

$$K = \frac{l/U_o}{\frac{d_z^2}{D_d}} = \frac{D_d l}{U_o d_z^2} = \frac{kTC}{3\pi\mu_f d_p U_o} \frac{D_d l}{d_z^2}$$

Η πιθανότητα εναπόθεσης με διάχυση Brown υπολογίζεται από τον παρακάτω τύπο σύμφωνα με τον Ingham (Ingham, D. B.,1975):

$$P_{D,z} = 1 - 0.819 e^{-14.63K} - 0.0967 e^{-89.22K} - 0.0325 e^{-228K} - 0.0509 e^{-125.9 K^{2/3}}$$

3.5 Μεταβολή των γεωμετρικών χαρακτηριστικών των πνευμόνων κατά την εισπνοή και εκπνοή

Κατά την εισπνοή και εκπνοή είναι σημαντικό να λάβουμε υπόψιν τη συστολή και διαστολή της διαμέτρου των αεραγωγών της κάθε γενιάς. Πρέπει να τονίσουμε ότι στη παρούσα εργασία δεν λαμβάνουμε υπόψιν τη συστολή και διαστολή των αεραγωγών και για αυτό το λόγο θα περιγράψουμε εν συντομία το μοντέλο ελαστικότητας όπως παρουσιάζεται από τους Lambert R.K., Wilson T.A., Hyatt R.E., Rodarte J.R., το οποίο θα χρησιμοποιηθεί σε συνδυασμό με τις ιδιότητες συμμόρφωσης (compliance properties) του πνεύμονα.

Πιο συγκεκριμένα η διάμετρος του αεραγωγού εκφράζεται ως συνάρτηση της ενδοθωρακικής πίεσης (intramural pressure), ΔP , που παρουσιάζονται από τις δύο παρακάτω εξισώσεις:

$$\frac{d_z^2}{d_{z,max}^2} = \alpha_0 \left(1 - \frac{\Delta P}{P_1}\right)^{-n_1}, \quad \Delta P \leq 0$$

$$\frac{d_z^2}{d_{z,max}^2} = 1 - (1 - \alpha_0) \left(1 - \frac{\Delta P}{P_2}\right)^{-n_2}, \quad \Delta P > 0$$

όπου, $P_1 = \alpha_0 n_1 / \alpha'_0$, $P_2 = -n_2 (1 - \alpha_0) / \alpha'_0$, $d_{z,max}$ είναι η μέγιστη διάμετρος του αεραγωγού της γενιάς z, και οι συντελεστές ελαστικότητας n_1 , n_2 , α_0 , α'_0 δίνονται από τους Lambert RK et al.

Η ενδοθωρακική πίεση μεταβάλλεται με τον χρόνο t σε συνάρτηση με τον στιγμιαίο όγκο $V_L(t)$ σύμφωνα με τη παρακάτω σχέση που δίνεται από τον Pollak AG. (1998).

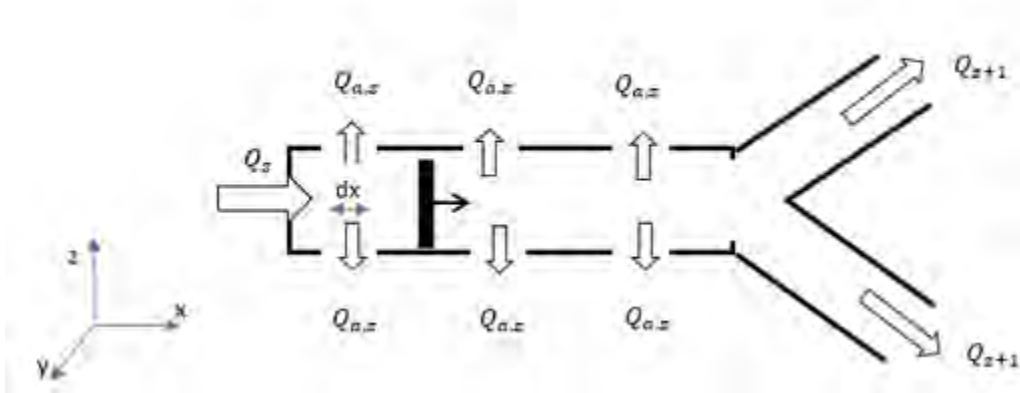
$$\Delta P(t) = \frac{V_{L,max} - V_{L,min}}{C_{L0}} \ln \left(\frac{V_{L,max} - V_{L,min}}{V_{L,max} - V_L(t)} \right)$$

όπου C_{L0} είναι η συμμόρφωση του πνεύμονα σε συνθήκες $\Delta P=0$ και $V_{L,max}$, $V_{L,min}$ περιγράφονται σε όρους TLC και RV ($V_{L,max} = TLC + 0.1L$, $V_{L,min} = RV - 0.1L$).

Για την εξαγωγή της παραπάνω σχέσης έχει υποτεθεί ψευδοϊσορροπία και η πτώση πίεσης κατά μήκος των αεραγωγών δεν λαμβάνεται υπόψιν.

3.6 Ογκομετρικές παροχές

Οι αεραγωγοί μιας γενιάς z θεωρούμε ότι είναι κύλινδροι διατομής $A_z = 2^z \left(\frac{\pi d_z^2}{4} \right)$ η οποία αυξάνεται ανάλογα με τον αριθμό των γενεών. Συγκεκριμένα για τις υπόλοιπες γενιές ($z \geq 15$) σύμφωνα με το μοντέλο του Weibel (Weibel, Saponale, & Filoche, 2005) περιμετρικά των αεραγωγών προστίθεται ο όγκος των κυψελίδων ($V_{a,z}$) της κάθε γενιάς z . Λαμβάνοντας υπόψιν τις πρωτεύουσες ροές που κυριαρχούν τόσο στον αεραγωγό όσο και στις κυψελίδες, θεωρούμε ότι η ροή είναι αξονική κατά μήκος του αεραγωγού και ακτινική προς τις κυψελίδες. Έστω Q_z η συνολική ογκομετρική παροχή της γενιάς z , $Q_{a,z}$ η συνολική ογκομετρική παροχή προς όλες τις κυψελίδες της γενιάς z και Q_{z+1} η συνολική ογκομετρική παροχή της γενιάς $z+1$ που ταυτίζεται με το τέλος της γενιάς z (σχήμα 3.9).



Σχήμα 3.9: Ογκομετρικές παροχές που συνδέουν τις γενιές z και $z+1$ και παρουσίαση ενός διαφορικού όγκου ελέγχου μήκους dx .

Η σχέση που συνδέει τις παραπάνω ογκομετρικές παροχές είναι η παρακάτω:

$$Q_z = Q_{a,z} + Q_{z+1} \quad (3.3)$$

Ακόμα θεωρούμε ότι το μήκος του αεραγωγού μεταβάλλεται κατά μήκος της διεύθυνσης x με αποτέλεσμα να ορίζουμε τη τοπική μεταβλητή x_z που περιγράφει τη τοπική μεταβολή του μήκους.

Θεωρούμε ως θετική φορά την αύξηση του μήκους του αεραγωγού x . Επομένως, οι ογκομετρικές παροχές Q_z που έχουν την συγκεκριμένη φορά καθώς και οι $Q_{a,z}$ που έχουν κατεύθυνση από τους αεραγωγούς προς τις κυψελίδες θεωρούνται θετικές, με αποτέλεσμα να συμπεραίνουμε ότι στην εισπνοή οι παροχές που αναφέραμε παραπάνω είναι θετικές και αρνητικές στην εκπνοή.

Η παραπάνω σχέση μπορεί να τροποποιηθεί θεωρώντας γραμμική μεταβολή της ογκομετρικής μεταβολής κατά το μήκος με αποτέλεσμα να προκύπτει :

$$Q(x_z) = Q_z - \frac{x_z}{l_z} Q_{a,z} \quad (3.4)$$

και η μέση ογκομετρική παροχή της γενιάς z , που υπολογίζεται στο μέσο του μήκους του αεραγωγού, υπολογίζεται από τη παρακάτω σχέση :

$$\bar{Q} = Q_z - \frac{1}{2} Q_{a,z} = Q(x_z = \frac{l_z}{2}) \quad (3.5)$$

Η τοπική ταχύτητα κατά μήκος του αεραγωγού ορίζεται :

$$u(x_z) = \frac{Q(x_z)}{A_z} \quad (3.6)$$

Και η μέση ταχύτητα της γενιάς z είναι :

$$U_o = \bar{u}_z = \frac{\bar{Q}_z}{A_z}$$

Έστω ότι ο χρόνος εισπνοής από το στόμα διαρκεί χρόνο T_{inh} (inhalation time) και εισάγεται συγκεκριμένη ποσότητα αέρα όγκου TV (Tidal Volume). Τότε η συνολική ογκομετρική παροχή στην είσοδο της τραχείας θα είναι :

$$Q_o = Q_{inh} = \frac{TV}{T_{inh}} \quad (3.7)$$

Θεωρούμε ότι έχουμε $N_{a,z}$ κυψελίδες στην γενιά z που καταλαμβάνουν συνολικό όγκο $V_{a,z}$. Όπως έχουμε αναφέρει, οι κυψελίδες θεωρούνται σφαιρικές με διάμετρο d_a . Με την υπόθεση ότι οι κυψελίδες διαστέλλονται με τον ίδιο ρυθμό καθώς και ότι ο όγκος μίας κυψελίδας είναι $V_{1a} = \frac{\pi d_a^3}{6}$ για τον οποίο υποθέτουμε πως οι υπόλοιπες διαστέλλονται με τον ίδιο ρυθμό συμπεραίνουμε ότι ισχύει :

$$\frac{dV_{1,a}}{dt} = \text{στάθερο} \quad (3.8)$$

Ο συνολικός όγκος των κυψελίδων για ολόκληρη τη γενιά είναι :

$$V_{a,z} = N_{a,z} V_{1,a} \quad (3.9)$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση 3.9 τον όγκο $V_{1,\alpha}$ βρίσκουμε τη σχέση για τη διάμετρο της κάθε κυψελίδας σε κάθε χρονική στιγμή.

$$V_{a,z} = N_{a,z} V_{1a} \Rightarrow V_{a,z} = N_{a,z} \frac{\pi d_a^3}{6} \Rightarrow d_a(t) = \sqrt[3]{\frac{6V_{a,z}(t)}{N_a \pi}}$$

Η ογκομετρική παροχή $Q_{a,z}$ προς τις κυψελίδες της γενιάς z είναι ίση με τη χρονική μεταβολή του συνολικού όγκου των κυψελίδων $V_{a,z}$ όπως φαίνεται από την παρακάτω εξίσωση:

$$Q_{a,z} = \frac{dV_{a,z}}{dt} \quad (3.10)$$

Στην συνέχεια ολοκληρώνοντας την εξίσωση 3.8 βρίσκουμε τον όγκο των κυψελίδων κάθε γενιάς σε κάθε χρονική στιγμή.

$$Q_{a,z} = \frac{dV_{a,z}}{dt} \Rightarrow Q_{a,z} dt = dV_{a,z} \Rightarrow \int_0^t Q_{a,z} dt = \int_{V_{a,z,0}}^{V_{a,z}(t)} dV_{a,z} \Rightarrow$$

$$V_{a,z}(t) = V_{a,z}(0) + \int_0^t Q_{a,z} dt$$

Η συνολική ογκομετρική παροχή στην είσοδο της τραχείας μπορεί να παρουσιαστεί διαφορετικά και από την παρακάτω σχέση :

$$Q_o = \frac{d(\sum_{z=0}^{23} V_{a,z})}{dt} \quad (3.11)$$

Συνδυάζοντας τις εξισώσεις 3.9 και 3.11 καταλήγουμε στο παρακάτω αποτέλεσμα:

$$Q_o = \frac{d(\sum_{z=0}^{23} V_{a,z})}{dt} = \frac{d(\sum N_{a,z} V_{1a})}{dt} = \sum (N_{a,z}) \frac{dV_{1a}}{dt} \quad (3.12)$$

Ακόμα συνδυάζοντας τις εξισώσεις 3.10 και 3.9 εξάγεται η παρακάτω σχέση :

$$Q_{a,z} = \frac{dV_{a,z}}{dt} = \frac{d(N_{a,z} V_{1a})}{dt} = N_{a,z} \frac{dV_{1a}}{dt} \quad (3.13)$$

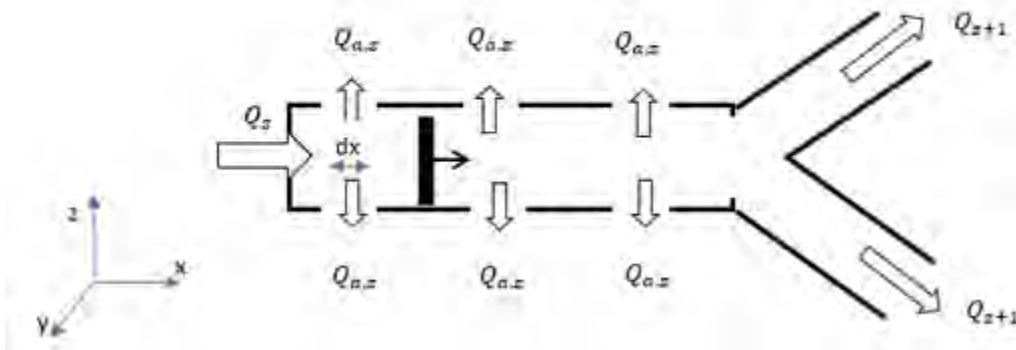
Διαιρώντας κατά μέλη τις εξισώσεις 3.12 και 3.13 προκύπτει η παρακάτω εξίσωση για την ογκομετρική παροχή προς τις κυψελίδες της γενιάς z .

$$Q_{a,z} = Q_o * \frac{V_{a,z}}{\sum V_{a,z}} \quad (3.14)$$

Κατά την εισπνοή και την εκπνοή έχουμε ως δεδομένη την ογκομετρική παροχή Q_o η οποία είναι στην πρώτη εισερχόμενη και στη δεύτερη εξερχόμενη με αντίθετα πρόσημα όπως αναφέραμε παραπάνω και στην συνέχεια από την εξίσωση 3.14 βρίσκουμε την ογκομετρική παροχή $Q_{a,z}$. Στην συνέχεια από την εξίσωση 3.3 βρίσκουμε τα Q_z για κάθε γενιά z.

3.7 Εισπνοή

Για τον αεραγωγό της γενιάς z που παρουσιάζεται στο παρακάτω σχήμα 3.9, που παρουσιάστηκε στη παράγραφο 3.6, βλέπουμε τις πρωτεύουσες ροές οι οποίες αποτελούνται από την ροή του αερολύματος κατά μήκος του κυρίου άξονα x και διαμέσου της παράπλευρης επιφάνειας. Στην πρώτη μορφή ροής, λαμβάνουν χώρα οι βασικοί μηχανισμοί εναπόθεσης που αναφέρθηκαν σε προηγούμενα κεφάλαια και στην δεύτερη παρουσιάζεται η ροή του αερολύματος προς τις κυψελίδες. Συγκεκριμένα στη πρώτη μορφή ροής έχουμε ένα ποσοστό των σωματιδίων να εναποτίθεται στα τοιχώματα του αεραγωγού και το υπόλοιπο να ακολουθεί τη δεύτερη ροή που έχει κατεύθυνση προς τις κυψελίδες. Με τον όρο “αερόλυμα” εννοούμε το ρευστό που φέρει σωματίδια τα οποία θα εναποθετηθούν στους πνεύμονες με βάση την ολική πιθανότητα εναπόθεσης ενός σωματιδίου της γενιάς z , $P_{t,z}$, η οποία μπορεί να υπολογιστεί από τους τύπους που αναφέραμε.



Σχήμα 3.9: Ογκομετρικές παροχές που συνδέουν τις γενιές z και $z+1$ και παρουσίαση ενός διαφορικού όγκου ελέγχου μήκους dx .

Στη διαφορική φέτα dx του σχήματος 3.9, η ροή αερολύματος dG με συγκέντρωση $c(x)$ (με μονάδες kg/m^3) πραγματοποιείται διαμέσου της παράπλευρης επιφάνειας και περιγράφεται από την παρακάτω εξίσωση:

$$dG_{inh} = \frac{Q_z(x)c(x)P_{t,z}}{l_z} dx + \frac{Q_{a,z}c(x)}{l_z} dx \quad (3.15)$$

Η εξίσωση 3.15 περιγράφει το τρόπο με τον οποίο ρέει το αερόλυμα κατά την είσοδό του διαμέσου της παράπλευρης επιφάνειας όπως ακριβώς περιγράψαμε στην αρχή του κεφαλαίου 3.7 με αποτέλεσμα να γίνεται φανερό ότι **ο πρώτος όρος αναφέρεται στο ποσοστό των σωματιδίων που εναποτίθεται στα τοιχώματα του αεραγωγού με πιθανότητα εναπόθεσης $P_{t,z}$ για τη γενιά z , ενώ ο δεύτερος όρος αναφέρεται στη ροή που έχει κατεύθυνση προς τις κυψελίδες.**

Στην συνέχεια στις επόμενες παραγράφους θα αποδείξουμε τις εξισώσεις διατήρησης μάζας για το αερόλυμα ξεχωριστά για τους αεραγωγούς και τις κυψελίδες.

3.7.1 Εξισώσεις διατήρησης μάζας του αερολύματος κατά τη ροή του στους αεραγωγούς

Σύμφωνα με το σχήμα 3.9 όπως προαναφέραμε, θεωρούμε ως όγκο ελέγχου μια διαφορική φέτα του αεραγωγού πάχους dx . Υποθέτουμε ότι η συγκέντρωση c του αερολύματος είναι σταθερή στη διατομή του αεραγωγού και επομένως και στη διαφορική φέτα πάχους dx του αεραγωγού. Σαν αποτέλεσμα λοιπόν, μπορούμε να πούμε ότι $c=c(x,t)$ [$= \text{kg}/\text{m}^3$].

Σύμφωνα με το θεώρημα μεταφοράς Reynolds (Reynolds Transport Theorem) η διατήρηση μάζας των σωματιδίων του αερολύματος, που είναι στην ουσία το ισοζύγιο μάζας του αερολύματος στον όγκο ελέγχου, εκφράζεται από τη παρακάτω εξίσωση:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{CV} c \, dV = - \int_{CS} c \vec{u} \cdot \hat{n} \, dA + \int_{CS} D_a \vec{\nabla} c \cdot \hat{n} \, dA \quad \left[\frac{\text{kg}}{\text{sec}} \right] \quad (3.16)$$

Στο αριστερό σκέλος της εξίσωσης 3.16 υπάρχει ο όρος της **συσσώρευσης (concentration)** και στο δεξί μέλος της εξίσωσης ο πρώτος όρος είναι η **συναγωγή (convection)** και ο δεύτερος είναι ο όρος της **μοριακής διάχυσης (molecular-Brownian diffusion)**.

Σύμφωνα με το σχήμα 3.9 που παρουσιάζεται ο όγκος ελέγχου, μπορούμε να πούμε ότι η επιφάνεια ελέγχου CS αποτελείται από τις επιφάνειες $A(x), A(x+dx)$, που είναι οι επιφάνειες κατά την εγκάρσια ροή του αερολύματος και την A_{yz} που είναι η

παράπλευρη επιφάνεια του αεραγωγού. Με βάση το παραπάνω σκεπτικό η εξίσωση 3.16 διαφοροποιείται όπως φαίνεται παρακάτω:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_x^{x+dx} cA dx = - \int_{A_x} \vec{c} \hat{n} dA + \int_{A_x} D_d \vec{\nabla} c \hat{n} dA - \int_{A_{yz}} \vec{c} \hat{n} dA + \int_{A_{yz}} D_d \vec{\nabla} c \hat{n} dA \quad (3.17)$$

Ορίζουμε ως J , με μονάδες $\text{kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$, τη ροή ανά μονάδα επιφάνειας με σκοπό να μπορέσουμε να υπολογίσουμε τα ολοκληρώματα της εξίσωσης 3.17 που αφορά ροή διαμέσου της παράπλευρης επιφάνειας. Επομένως, η συνολική ροή από την επιφάνεια A_{yz} θα είναι η ολοκλήρωση της ποσότητας J όπως φαίνεται παρακάτω:

$$\int_{A_{yz}} J \hat{n} dA = [\text{Εκροή διαμέσου της } yz] - [\text{Εισροή διαμέσου της } yz] \quad (3.18)$$

Το δεξί μέλος της εξίσωσης 3.18 εκφράζεται από την εξίσωση 3.15 και επομένως μπορούμε να πούμε ότι :

$$\int_{A_{yz}} J \hat{n} dA = dG = \frac{Q_z(x)c(x)P_{t,z}}{l_z} dx + \frac{Q_{a,z}c(x)}{l_z} dx \Leftrightarrow$$

$$\int_{A_{yz}} J \hat{n} dA = dG = \frac{(Q_z(x)P_{t,z} + Q_{a,z})c(x)}{l_z} dx \quad (3.19)$$

Θέτω το δεξί μέλος της εξίσωσης 3.19 ως εξής :

$$Ldx = - \frac{(Q_z(x)P_{t,z} + Q_{a,z}(x))c(x)}{l_z} dx \quad (3.19\alpha)$$

με αποτέλεσμα η εξίσωση να αλλάζει :

$$\int_{A_{yz}} J \hat{n} dA = -Ldx \quad (3.20)$$

Με βάση την εξίσωση 3.20 και παρατηρώντας προσεκτικά την εξίσωση 3.17 βλέπουμε οι δύο τελευταίοι όροι, $-\int_{A_{yz}} \vec{c}\hat{u}\hat{n} dA + \int_{A_{yz}} D_d \vec{\nabla}c\hat{n} dA$, που περιγράφουν τη συνολική ροή διαμέσου της παράπλευρης επιφάνειας, εκφράζονται από την εξίσωση 3.18 διότι εκφράζουν εισροή μείον εκροή διαμέσου της επιφάνειας A_{yz} .

Σαν αποτέλεσμα, μπορούν να εκφραστούν από την εξίσωση 3.20 ως εξής :

$$-\int_{A_{yz}} \vec{c}\hat{u}\hat{n} dA + \int_{A_{yz}} D_d \vec{\nabla}c\hat{n} dA = Ldx \quad (3.21)$$

Μεταφέροντας τον όρο Ldx στο δεξί μέλος της σχέσης 3.21 και με χρήση της 3.20 έχουμε το παρακάτω αποτέλεσμα για τη ροή ανά μονάδα επιφάνειας:

$$\begin{aligned} -\int_{A_{yz}} \vec{c}\hat{u}\hat{n} dA + \int_{A_{yz}} D_d \vec{\nabla}c\hat{n} dA + \int_{A_{yz}} J\hat{n} dA &= 0 \Rightarrow \\ \int_{A_{yz}} (J - \vec{c}\hat{u} + D_d \vec{\nabla}c)\hat{n} dA &= 0 \end{aligned}$$

Όπου για να ισχύει η ισότητα του ολοκληρώματος με το μηδέν, πρέπει η ολοκληρωτέα συνάρτηση να μηδενίζεται και τελικά βρίσκουμε :

$$J = \vec{c}\hat{u} + D_d \vec{\nabla}c \quad (3.21a)$$

Η ανάλυσή μας θα συνεχιστεί με τους υπόλοιπους όρους της εξίσωσης 3.17, με την εξέταση του όρου της διάχυσης, της συναγωγής και της συσσώρευσης.

Για τον όρο της διάχυσης με την υπόθεση ότι η διαχυτότητα είναι σταθερή στη διατομή :

$$\begin{aligned} \int_{A_x} D_d \vec{\nabla} c \hat{n} dA &= \int_{A_{x1}} D_d \vec{\nabla} c \hat{n} dA + \int_{A_{x2}} D_d \vec{\nabla} c \hat{n} dA = \\ &= \int_{A_{x1}} D_d \left(-\frac{\partial c}{\partial x}\right) dA + \int_{A_{x2}} D_d \frac{\partial c}{\partial x} dA = \\ &= -D_d \left(\frac{\partial c}{\partial x}\right) \int_{A_{x1}} dA + D_d \frac{\partial c}{\partial x} \int_{A_{x2}} dA = (D_d A \frac{\partial c}{\partial x})_{x+dx} - (D_d A \frac{\partial c}{\partial x})_x \end{aligned}$$

Στη συνέχεια, θα χρησιμοποιήσουμε το ανάπτυγμα Taylor για τον όρο της διάχυσης:

$$\int_{A_x} D_d \vec{\nabla} c \hat{n} dA = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_d A \frac{\partial c}{\partial x} \right) dx + O(dx^2) = \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(D_d A \frac{\partial c}{\partial x} \right) + O(dx) \right) dx$$

Για τον όρο της συναγωγής με τη θεώρηση ότι η u είναι η μέση ταχύτητα της διατομής (mean cross-section velocity) στη x -διεύθυνση προκύπτει:

$$\int_{A_x} c \vec{u} \hat{n} dA = (cuA)_x - (cuA)_{x+dx} = (cQ)_x - (cQ)_{x+dx}$$

Στη συνέχεια με όμοιο τρόπο θα χρησιμοποιήσουμε το ανάπτυγμα Taylor για τον όρο της συναγωγής :

$$\int_{A_x} c \vec{u} \hat{n} dA = \left(\frac{\partial (cQ)}{\partial x} + O(dx) \right) dx$$

Για τον όρο της συσσώρευσης :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_x^{x+dx} cA dx = \frac{\partial (cA)}{\partial t} dx$$

Στη παράγραφο 3.4.5 συζητήσαμε για την ενεργή διαχυτότητα και για τους τύπους που υπάρχουν στη βιβλιογραφία για την φαινομενική διαχυτότητα, με αποτέλεσμα να είναι πιο σωστό να χρησιμοποιήσουμε για τον όρο της διάχυσης την συνολική διαχυτότητα που εκφράζεται από τον συντελεστή της ενεργής διαχυτότητας. Επομένως, με αντικατάσταση των παραπάνω σχέσεων στη σχέση 3.17 παίρνουμε το παρακάτω αποτέλεσμα :

$$\frac{\partial(cA)}{\partial t} dx = \left(-\frac{\partial(cQ)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{eff} A \frac{\partial c}{\partial x} \right) + L + O(dx) \right) dx$$

Θεωρούμε αμελητέους τους όρους $O(dx)$ και με βάση την εξίσωση 3.19a καταλήγουμε στη παρακάτω εξίσωση που εκφράζει την διατήρηση μάζας του αερολύματος συγκέντρωσης $c(x,t)$ στους αεραγωγούς :

$$\frac{\partial(cA)}{\partial t} = -\frac{\partial(cQ)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{eff} A \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \frac{\left(Q_z(x) P_{t,z} + Q_{a,z}(x) \right) c(x)}{l_z} \quad (3.22)$$

3.7.2 Εισπνοή στις κυψελίδες

Όπως έχουμε αναφέρει για τις γενιές $z=15$ έως $z=23$, οι αεραγωγοί καλύπτονται περιφερειακά από κυψελίδες. Εντός των κυψελίδων, με τη θεώρηση πλήρους ανάμιξης (Κεφάλαιο 2) η συγκέντρωση παραμένει σταθερή σε όλο τον όγκο τους και ίση με $c_{a,z}(t)$. Δηλαδή, η συγκέντρωση μίας κυψελίδας εξαρτάται από τη γενιά, τη θέση της στον αεραγωγό και το χρόνο.

Η εξίσωση διατήρησης μάζας για τις κυψελίδες σε έναν όγκο ελέγχου είναι η εξής:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{CV} c \, dV = [\text{εισροή}] - [\text{εκροή}] \quad (3.23)$$

Για το αριστερό μέλος της εξίσωσης ισχύει,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{CV} c \, dV = \frac{\partial}{\partial t} (V_{a,z} c_{a,z}) \quad (3.23a)$$

μιας και στον όγκο της κυψελίδας ($V_{a,z}$) -όπως αναφέρθηκε- η συγκέντρωση θεωρείται σταθερή και ίση με $c_{a,z}$.

Η εισροή ισούται με την ποσότητα των σωματιδίων που περνούν από τα τοιχώματα των αεραγωγών προς τις κυψελίδες. Επομένως, η εισροή κατά την εισπνοή ισούται με τη ροή των σωματιδίων που εισέρχονται στις κυψελίδες καθώς και με το ποσοστό των σωματιδίων που προσκρούουν στα τοιχώματα των αεραγωγών λόγω μηχανισμών εναπόθεσης και βρίσκουν ανοιχτή δίοδο προς το εσωτερικό των κυψελίδων. Άρα,

$$[\text{εισροή}] = f_z \frac{P_{t,z} Q}{l_z} c \Delta x_z + \frac{Q_{a,z}}{l_z} c \Delta x_z \quad (3.23b)$$

όπου f_z το ποσοστό του τοιχώματος των αεραγωγών της γενιάς z που είναι ανοικτό προς τις κυψελίδες.

Αντίθετα, η εκροή ισούται με τις εναποθέσεις των σωματιδίων στα τοιχώματα εντός των κυψελίδων.

Θεωρώντας τις κυψελίδες ως σφαίρες, οι εναποθέσεις στα τοιχώματά τους προκύπτουν από τους μηχανισμούς της **Βαρυτικής Καθίζησης (Gravitational Settling)** και της **εναπόθεσης λόγω Διάχυσης Brown (Brownian Diffusion/Motion)**.

Σε μία κυψελίδα, σε χρόνο dt , θα εναποτεθούν λόγω βαρύτητας όσα σωματίδια βρίσκονται σε όγκο $(v_{\text{settling}}dt)(\pi d_a^2/4)$, όπου v_{settling} είναι η ταχύτητα καθίζησης του σωματιδίου και d_a η διάμετρος της κυψελίδας.

Όσον αφορά τον όγκο μιας κυψελίδας, αυτός ισούται με $V_{1a} = \pi d_a^3/6$. Αν $N_{a,z}$ ο συνολικός αριθμός κυψελίδων σε μία γενιά, υπολογίζουμε τον συνολικό όγκο των κυψελίδων μιας γενιάς ως εξής,

$$V_{a,z} = N_{a,z}V_{1a} = N_{a,z}\pi d_a^3/6$$

Οπότε, σε ολόκληρη τη γενιά, ο συνολικός ρυθμός εναπόθεσης των σωματιδίων λόγω βαρύτητας, ισούται με:

$$\frac{1}{dt}(v_{\text{settling}}dt)\frac{\pi d_a^2}{4}c_{a,z}N_{a,z} = v_{\text{settling}}\frac{\pi d_a^2}{4}c_{a,z}\frac{V_{a,z}}{\frac{\pi d_a^3}{6}} = \frac{3v_{\text{settling}}}{2d_a}V_{a,z}c_{a,z} \quad (3.24a)$$

Η εναπόθεση σωματιδίων λόγω διάχυσης Brown, συμβαίνει λόγω της διαφοράς συγκέντρωσης ανάμεσα στο εσωτερικό της κυψελίδας κοντά στο τοίχωμα, και στο ίδιο το τοίχωμα. Η συγκέντρωση κοντά στο τοίχωμα θεωρείται σταθερή και ίση με $c_{a,z}$ (λόγω υπόθεσης πλήρους ανάμιξης), ενώ η συγκέντρωση πάνω στο τοίχωμα θεωρείται μηδενική. Το πάχος κοντά στο τοίχωμα της κυψελίδας όπου παρατηρείται διαφορετική της $c_{a,z}$ συγκέντρωσης καλείται **οριακό στρώμα, δ** . Το οριακό στρώμα αυτό, σχετίζεται με τη διάμετρο της κυψελίδας, d_a .

$$\delta = d_a/\gamma$$

όπου το γ αποτελεί μία εμπειρική παράμετρο που συνήθως θεωρείται ίση με 10.

Με βάση το παραπάνω, ο ρυθμός εναπόθεσης των σωματιδίων λόγω διάχυσης, σε ολόκληρη τη γενιά ισούται με:

$$D_d \frac{c_{a,z}}{\delta} (\pi d_a^2) N_{a,z} = \frac{\gamma D_d}{d_a^2} V_{a,z} c_{a,z} \quad (3.24b)$$

Επομένως, η συνολική εκροή προκύπτει ίση με το άθροισμα των εξισώσεων 3.24a και 3.24b.

$$[\text{εκροή}] = \frac{3V_{\text{settling}}}{2d_a} V_{a,z} c_{a,z} + \frac{\gamma D_d}{d_a^2} V_{a,z} c_{a,z}$$

Θέτοντας την μεταβλητή $\gamma_z = \left(\frac{3V_{\text{settling}}}{2d_a} + \frac{\gamma D_d}{d_a^2} \right)$, η παραπάνω εξίσωση γίνεται,

$$[\text{εκροή}] = \gamma_z V_{a,z} c_{a,z} \quad (3.23c)$$

Με αντικατάσταση της εξίσωσης 3.23 με τις ποσότητες των εξισώσεων 3.23a, 3.23b και 3.23c, προκύπτει η τελική εξίσωση διατήρησης μάζας για τις κυψελίδες,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (V_{a,z} c_{a,z}) &= f_z \frac{P_{t,z} Q}{l_z} c \Delta x_z + \frac{Q_{a,z}}{l_z} c \Delta x_z - \gamma_z V_{a,z} c_{a,z} \Rightarrow \\ \frac{\partial}{\partial t} (V_{a,z} c_{a,z}) &= \left(\frac{f_z Q P_{t,z}}{l_z} + \frac{Q_{a,z}}{l_z} \right) \Delta x_z c - \gamma_z V_{a,z} c_{a,z} \quad (3.24) \end{aligned}$$

Όπως αναφέραμε παραπάνω, ορίσαμε ως f_z το ποσοστό του τοιχώματος των αεραγωγών της γενιάς z που είναι ανοικτό προς τις κυψελίδες. Επιπλέον, ορίζουμε ως b το ποσοστό της επιφάνειας της κυψελίδας σφαιρικού σχήματος που λείπει εξαιτίας του ίδιου ανοίγματος που αναφέραμε στον ορισμό του f_z προηγουμένως.

Επομένως, μπορούμε να ορίσουμε τον ρυθμό εναπόθεσης στο σφαιρικό όγκο των κυψελίδων σύμφωνα με τον παρακάτω τύπο :

$$L_{a,z} = \gamma_z V_{a,z} c_{a,z}$$

που είναι στην ουσία η εκροή από τον κυψελιδικό όγκο όπως παρουσιάσαμε στην εξίσωση 3.23c . Όπως αναφέραμε παραπάνω, εξίσωση διατήρησης μάζας του αερολύματος στους αεραγωγούς είναι η παρακάτω:

$$\frac{\partial(cA)}{\partial t} = -\frac{\partial(cQ)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{eff} A \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \frac{(Q_z(x)P_{t,z} + Q_{a,z}(x))c(x)}{l_z} \left[= \frac{kg}{m sec} \right] \quad (3.25)$$

Από την εξίσωση 3.25 λείπει ο όρος της εκροής από τον κυψελιδικό όγκο, ο οποίος εισέρχεται στους αεραγωγούς με αποτέλεσμα η εξίσωση να τροποποιείται και καταλήγουμε στη παρακάτω εξίσωση διατήρησης μάζας του αερολύματος για τους αεραγωγούς:

$$\frac{\partial(cA)}{\partial t} = -\frac{\partial(cQ)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{eff} A \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \frac{(Q_z(x)P_{t,z} + Q_{a,z}(x))c(x)}{l_z} + b \frac{L_{a,z}}{l_z} \quad (3.26)$$

4. Αριθμητική ανάλυση του προβλήματος

4.1 Εισαγωγή στη Μέθοδο Πεπερασμένων Όγκων Ελέγχου

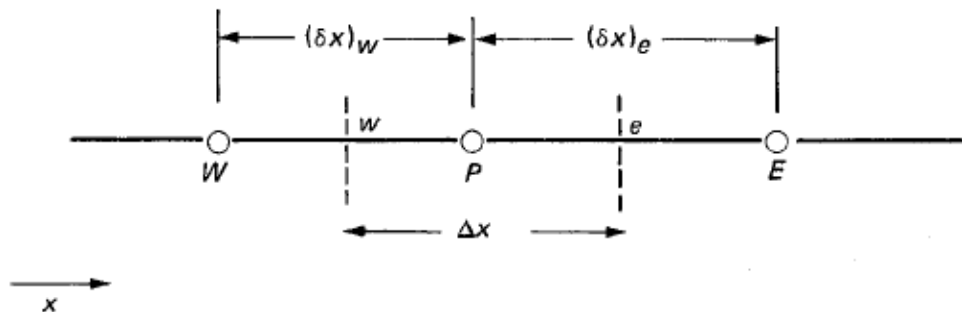
Η μέθοδος των **Πεπερασμένων Όγκων Ελέγχου (finite volume method)** ανήκει στις **ολοκληρωτικές μεθόδους (integral methods)** αριθμητικής επίλυσης των μερικών διαφορικών εξισώσεων και μπορεί να αντιμετωπίσει με επιτυχία προβλήματα μεταφοράς θερμότητας, μάζας και ορμής. Στις ολοκληρωτικές μεθόδους η διακριτοποιημένη εξίσωση προκύπτει από την ολοκλήρωση της εξίσωσης μεταφοράς πάνω σε κάποιο πεπερασμένο όγκο ελέγχου, σε αντίθεση με τις μη-ολοκληρωτικές μεθόδους, όπως για παράδειγμα η μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών, όπου η διακριτοποιημένη εξίσωση προκύπτει από τη διαφορική μορφή της εξίσωσης μεταφοράς με προσέγγιση διαφορών των μερικών παραγώγων.

4.1.1 Διακριτοποίηση σε πρόβλημα μεταφοράς μάζας με μοριακή διάχυση

Η εξίσωση μεταφοράς μάζας με μοριακή διάχυση περιγράφεται από την παρακάτω εξίσωση,

$$\frac{d}{dx} \left(D_{eff} \frac{dc}{dx} \right) + S = 0 \quad (4.1)$$

όπου D_{eff} είναι η ενεργή διαχυτότητα (effective diffusivity), c είναι η συγκέντρωση του αερολύματος και S είναι ο όρος πηγής ανά μονάδα όγκου.



Σχήμα 4.1: Όγκος ελέγχου μήκους Δx στον οποίο θα βασιστεί η διακριτοποίηση των εξισώσεων μεταφοράς μάζας για την εισπνοή και την εκπνοή (Patankar, 1980).

Η εξίσωση 4.1 θα ολοκληρωθεί στον πεπερασμένο όγκο ελέγχου που παρουσιάζεται στο σχήμα 4.1 και τα τα πρόσωπα του όγκου ελέγχου παριστάνονται από τις διακεκομμένες γραμμές στο παρακάτω σχήμα. Στο σχήμα παρουσιάζονται τα τρία σημεία W,P,E και στη συγκεκριμένη μέθοδο θα επικεντρωθούμε στο σημείο P το οποίο έχει ως γειτονικά σημεία τα W και E που συμβολίζουν την δυτική και ανατολική πλευρά του πλέγματος αντίστοιχα. Για το μονοδιάστατο πρόβλημα θεωρούμε ότι το πάχος είναι μοναδιαίο στις διευθύνσεις y και z με αποτέλεσμα ο όγκος του όγκου ελέγχου που παρουσιάζεται στο σχήμα 4.1 να είναι $(\Delta x) \times (1) \times (1)$.

Στη συνέχεια θα ολοκληρώσουμε την εξίσωση 4.1 στον όγκο ελέγχου του σχήματος 4.1 και θα προκύψει η παρακάτω εξίσωση:

$$(D_{eff} \frac{dc}{dx})_e - (D_{eff} \frac{dc}{dx})_w + \int_w^e S dx = 0$$

Υποθέτοντας ότι η θερμοκρασία ακολουθεί γραμμική κατανομή και θεωρώντας μια μέση τιμή για τον όρο πηγής \bar{S} παίρνουμε το παρακάτω αποτέλεσμα

$$\frac{D_{eff_e}(c_E - c_P)}{(\delta x)_e} - \frac{D_{eff_w}(c_P - c_W)}{(\delta x)_w} + \bar{S}\Delta x = 0$$

Στη συνέχεια μετά από αλγεβρικές πράξεις καταλήγουμε στη παρακάτω συνηθισμένη μορφή διακριτοποίησης εξισώσεων:

$$a_P c_P = a_E c_E + a_W c_W + b \quad (4.2)$$

όπου

$$a_E = \frac{D_{eff_e}}{(\delta x)_e}$$

$$a_W = \frac{D_{eff_w}}{(\delta x)_w}$$

$$a_P = a_E + a_W$$

$$b = \bar{S}\Delta x$$

Είναι πιο ορθό υπολογιστικά να χρησιμοποιηθεί γραμμική συσχέτιση του όρου πηγής με τη συγκέντρωση αερολύματος, έτσι ώστε να υπάρχει μικρότερο σφάλμα κατά τη διακριτοποίηση των εξισώσεων.

Επιλέγεται η παρακάτω σχέση για τη συσχέτιση του όρου πηγής με τη συγκέντρωση (Patankar,1980):

$$\bar{S} = S_C + S_P c_P$$

Η παραπάνω σχέση έχει σαν αποτέλεσμα να τροποποιηθεί η σχέση 4.2 διότι αλλάζει ο όρος πηγής και μετά από πράξεις λαμβάνουμε τις σχέσεις διακριτοποίησης όπως παρουσιάζονται παρακάτω:

$$a_P c_P = a_E c_E + a_W c_W + b \quad (4.3)$$

$$a_E = \frac{D_{eff_e}}{(\delta x)_e} \quad (4.4a)$$

$$a_W = \frac{D_{eff_W}}{(\delta x)_W} \quad (4.4b)$$

$$a_P = a_E + a_W - S_P \Delta x \quad (4.4c)$$

$$b = S_C \Delta x \quad (4.4d)$$

4.1.2 Οι τέσσερις βασικοί κανόνες (Four Basic Rules)

Σύμφωνα με τον Patankar (1980), θα περιγράψουμε παρακάτω τους τέσσερις βασικούς κανόνες που πρέπει να ικανοποιούνται κατά τη διακριτοποίηση με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου.

Κανόνας 1:

Σε περίπτωση που ένα μέτωπο είναι κοινό για δύο διπλανούς όγκους ελέγχου η ροή διαμέσου της επιφάνειας του μετώπου πρέπει να εκφράζεται από την ίδια σχέση διακριτοποίησης για τους δύο όγκους ελέγχου.

Κανόνας 2:

Θα ήταν χρήσιμο να παρουσιάσουμε την εξίσωση 4.3 στη παρακάτω μορφή

$$a_P c_P = \sum a_{nb} c_{nb} + b \quad (4.5)$$

όπου a_{nb} είναι οι συντελεστές των σημείων που βρίσκονται γειτονικά του P και έχουν συγκεντρώσεις c_{nb} .

Όπως γίνεται φανερό από τη σχέση 4.5 η τιμή του σημείου P σε ένα τυχαίο σημείο πάνω στο πλέγμα επηρεάζεται από τις τιμές των σημείων που βρίσκονται γειτονικά με αποτέλεσμα να έχει δημιουργηθεί ο δεύτερος κανόνας σύμφωνα με τον οποίο ισχύει :

Οι συντελεστές a_P και a_{nb} πρέπει να είναι θετικοί.

Κανόνας 3:

Μια προσεκτική ματιά στις εξισώσεις 4.4 δείχνει ότι ακόμα και αν οι συντελεστές των γειτονικών σημείων είναι θετικοί, ο συντελεστής του κεντρικού σημείου P μπορεί να γίνει αρνητικός από τον όρο S_P , με αποτέλεσμα να έχει δημιουργηθεί ο τρίτος κανόνας σύμφωνα με τον οποίο ισχύει :

Όταν έχει χρησιμοποιηθεί η συσχέτιση της μορφής $\bar{S} = S_C + S_P c_P$, ο συντελεστής S_P πρέπει να είναι μικρότερος ή ίσος του μηδενός.

Κανόνας 4:

Για περιπτώσεις στις οποίες η διαφορική εξίσωση συνεχίζει να ισχύει όταν η εξαρτημένη μεταβλητή μεταβληθεί κατά μία σταθερά ξ (στο πρόβλημα της μεταφοράς μάζας που αναφερθήκαμε η μεταβολή αυτή αντιστοιχεί σε μεταβολή από c σε $c+\xi$), ισχύει ότι $a_p = \sum a_{nb}$

4.1.3. Διακριτοποίηση σε πρόβλημα μεταφοράς θερμότητας με συναγωγή

Ορίζουμε τη γενική μεταβλητή φ που χαρακτηρίζει το πεδίο ροής και τον συντελεστή διάχυσης Γ που θα χρησιμοποιηθούν στις εξισώσεις συναγωγής και διάχυσης που θα παρουσιαστούν παρακάτω και στη συνέχεια θα διακριτοποιηθούν με τη μέθοδο **των πεπερασμένων όγκων ελέγχου**. Το πεδίο ροής πρέπει να ικανοποιεί την εξίσωση συνέχειας που περιγράφεται από τη παρακάτω εξίσωση

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0$$

και την γενική διαφορική εξίσωση που περιλαμβάνει τον όρο συναγωγής και διάχυσης όπως φαίνεται παρακάτω στη γενική της μορφή,

$$\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j \varphi) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\Gamma \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right) + S \quad (4.6)$$

Η ανάλυση θα περιοριστεί για μόνιμη και μονοδιάστατη ροή και θεωρώντας τον όρο πηγής ασήμαντο η εξίσωση 4.6 αλλάζει όπως φαίνεται

$$\frac{d}{dx} (\rho u \varphi) = \frac{d}{dx} \left(\Gamma \frac{d\varphi}{dx} \right) \quad (4.7)$$

όπου u είναι η ταχύτητα στη κατεύθυνση x .

Η εξίσωση 4.7 θα ολοκληρωθεί στον όγκο ελέγχου που παρουσιάζεται στο σχήμα 4.1 θεωρώντας γραμμική κατανομή της μεταβλητής φ στο πεδίο ροής και οι τιμές της μεταβλητής φ στα μέτωπα των όγκων ελέγχου υπολογίζονται με γραμμική παρεμβολή: $\varphi_e = \frac{1}{2}(\varphi_E + \varphi_P)$, $\varphi_w = \frac{1}{2}(\varphi_P + \varphi_W)$

Επομένως η εξίσωση 4.7 μετά την ολοκλήρωσή της στον όγκο ελέγχου οδηγεί στο παρακάτω αποτέλεσμα :

$$\frac{1}{2}(\rho u)_e(\varphi_E + \varphi_P) - \frac{1}{2}(\rho u)_w(\varphi_P + \varphi_W) = \frac{D_e(\varphi_E - \varphi_P)}{(\delta x)_e} - \frac{D_w(\varphi_P - \varphi_W)}{(\delta x)_w} \quad (4.8)$$

Ορίζουμε $F = \rho u$ [$=\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$] την δύναμη της συναγωγής και $D = \Gamma/\delta x$ με το D να είναι πάντα θετικό ενώ το F να παίρνει τιμές θετικές ή αρνητικές ανάλογα με τη κατεύθυνση της ροής.

Στη συνέχεια διακριτοποιούμε την εξίσωση 4.8 και καταλήγουμε στις παρακάτω εξισώσεις :

$$a_P \varphi_P = a_E \varphi_E + a_W \varphi_W \quad (4.9)$$

όπου

$$a_E = D_e - \frac{F_e}{2} \quad (4.10a)$$

$$a_W = D_w + \frac{F_w}{2} \quad (4.10b)$$

$$a_P = D_e + \frac{F_e}{2} + D_w - \frac{F_w}{2} = a_E + a_W + (F_e - F_w) \quad (4.10c)$$

Η εξίσωση 4.9 όπως αναφέραμε παραπάνω προϋποθέτει ότι η κατανομή του φ είναι γραμμική και η μορφή αυτής της διακριτοποιημένης εξίσωσης είναι γνωστή ως σχήμα κεντρών διαφορών. Οι εξισώσεις 4.10 δείχνουν ότι οι συντελεστές μπορούν να λάβουν αρνητικές τιμές σε ορισμένες περιπτώσεις με συνέπεια να οδηγούμαστε σε αφύσικα αποτελέσματα διότι παραβιάζεται ένας από τους τέσσερις κανόνες που αναφέραμε παραπάνω. Όταν το μέτρο του F είναι μεγαλύτερο από το διπλάσιο του D και αναλόγως το πρόσημο του F υπάρχει πιθανότητα οι συντελεστές a_E και a_W να γίνουν αρνητικοί.

Επίσης, οι αρνητικοί συντελεστές μπορεί να είναι μια ισχυρή ένδειξη ότι το a_P είναι μικρότερο του $\sum a_{nb}$ με αποτέλεσμα να μην ικανοποιείται ο τέταρτος κανόνας. Ακόμα στη περίπτωση της μηδενικής διάχυσης προκύπτει $a_P = 0$ με αποτέλεσμα η εξίσωση διακριτοποίησης 4.9 να είναι ακατάλληλη προς επίλυση.

4.1.4 Διακριτοποίηση σε σχήμα ανάντη διαφορών

Για να ξεπεραστούν οι παραπάνω δυσκολίες χρησιμοποιείται για τους όρους συναγωγής το σχήμα των ανάντη διαφορών. Για παράδειγμα, στο ανατολικό μέτωπο του όγκου ελέγχου, η τιμή της φ ορίζεται, σύμφωνα με το σχήμα των ανάντη διαφορών όπως φαίνεται παρακάτω

$$\varphi_e = \varphi_P \quad F_e > 0 \quad (4.11a)$$

$$\varphi_e = \varphi_E \quad F_e < 0 \quad (4.11b)$$

Η τιμή του φ_w για δυτικό μέτωπο του όγκου ελέγχου ορίζεται αντίστοιχα από τις σχέσεις

$$\varphi_w = \varphi_W \quad F_e > 0 \quad (4.12a)$$

$$\varphi_w = \varphi_P \quad F_e < 0 \quad (4.12b)$$

Για την ολοκλήρωση της εξίσωσης 4.7 χρησιμοποιήσαμε τη γραμμική παρεμβολή για τον υπολογισμό της μεταβλητής φ στα μέτωπα του όγκου ελέγχου. Στη θέση αυτών των εξισώσεων βάζουμε τη παρακάτω εξίσωση

$$F_e \varphi_e = \varphi_P \max[F_e, 0] - \varphi_E \max[-F_e, 0]$$

με αποτέλεσμα να έχουμε εξίσωση διακριτοποίησης με διαφορετικούς συντελεστές

$$a_P \varphi_P = a_E \varphi_E + a_W \varphi_W$$

όπου

$$a_E = D_e + \max[-F_e, 0]$$

$$a_W = D_w + \max[F_w, 0]$$

$$a_P = D_e + \max[F_e, 0] + D_w + \max[-F_w, 0] = a_E + a_W + (F_e - F_w)$$

Από τις παραπάνω εξισώσεις είναι φανερό ότι δεν μπορούν να προκύψουν αρνητικοί συντελεστές με αποτέλεσμα να μην υπάρχει το ενδεχόμενο να παραβιάζεται κάποιος από τους κανόνες που αναφέραμε παραπάνω.

4.1.5 Διακριτοποίηση σε πρόβλημα μεταφοράς μάζας με μοριακή διάχυση για μη μόνιμες συνθήκες

Η εξίσωση μεταφοράς μάζας με μοριακή διάχυση για μη μόνιμες συνθήκες περιγράφεται από την παρακάτω εξίσωση,

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (4.13)$$

Με δεδομένες τις τιμές της συγκέντρωσης τη χρονική στιγμή t θα βρούμε τις συγκεντρώσεις τις επόμενες χρονικές στιγμές $t+\Delta t$. Συμβολίζουμε τις δεδομένες τιμές των συγκεντρώσεων στους κόμβους ως c^n και οι νέες δηλαδή οι άγνωστες τιμές της συγκέντρωσης σε επόμενες χρονικές στιγμές συμβολίζονται ως c^{n+1} .

Ολοκληρώνοντας την εξίσωση 4.13 στο όγκο ελέγχου που παρουσιάζεται στο σχήμα 4.1 λαμβάνουμε το παρακάτω αποτέλεσμα :

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial c}{\partial t} dt dx = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x} \right) dx dt \Rightarrow$$

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial c}{\partial t} dt dx = \Delta x (c_P^{n+1} - c_P^n)$$

$$\Delta x (c_P^{n+1} - c_P^n) = \int_t^{t+\Delta t} \left[D_{\text{eff},e}^{n+1} \frac{c_E^{n+1} - c_P^{n+1}}{(\delta x)_e} - D_{\text{eff},w}^{n+1} \frac{c_P^{n+1} - c_W^{n+1}}{(\delta x)_w} \right] dt \quad (4.14)$$

Σ' αυτό το σημείο πρέπει να υποθέσουμε το τρόπο με τον οποίο μεταβάλλεται η συγκέντρωση στους κόμβους W, P, E κατά τη μεταβολή από t σε $t+\Delta t$.

Μια γενική υπόθεση είναι η ακόλουθη:

$$\int_t^{t+\Delta t} c_P dt = [f c_P^{n+1} + (1-f) c_P^n] \Delta t \quad (4.15)$$

όπου f είναι ένας συντελεστής βαρύτητας (weighting factor) που παίρνει τιμές μεταξύ 0 και 1 .

Στην ανάλυση διακριτοποίησης που θα ακολουθήσει επιλέγουμε ο συντελεστής να έχει μοναδιαία τιμή. Επομένως η εξίσωση 4.15 είναι:

$$\int_t^{t+\Delta t} c_P dt = c_P^{n+1} \Delta t \quad (4.16)$$

Επομένως η εξίσωση 4.14 τελικά ολοκληρώνεται και προκύπτει:

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} (c_P^{n+1} - c_P^n) = D_{eff,e}^{n+1} \frac{c_E^{n+1} - c_P^{n+1}}{(\delta x)_e} - D_{eff,w}^{n+1} \frac{c_P^{n+1} - c_W^{n+1}}{(\delta x)_w} \quad (4.17)$$

Στη συνέχεια διακριτοποιούμε την εξίσωση 4.17 και καταλήγουμε στις παρακάτω εξισώσεις:

$$a_P c_P^{n+1} = a_E c_E^{n+1} + a_W c_W^{n+1} + a_P^n c_P^n$$

$$a_E = \frac{D_{eff,e}^{n+1}}{(\delta x)_e}$$

$$a_W = \frac{D_{eff,w}^{n+1}}{(\delta x)_w}$$

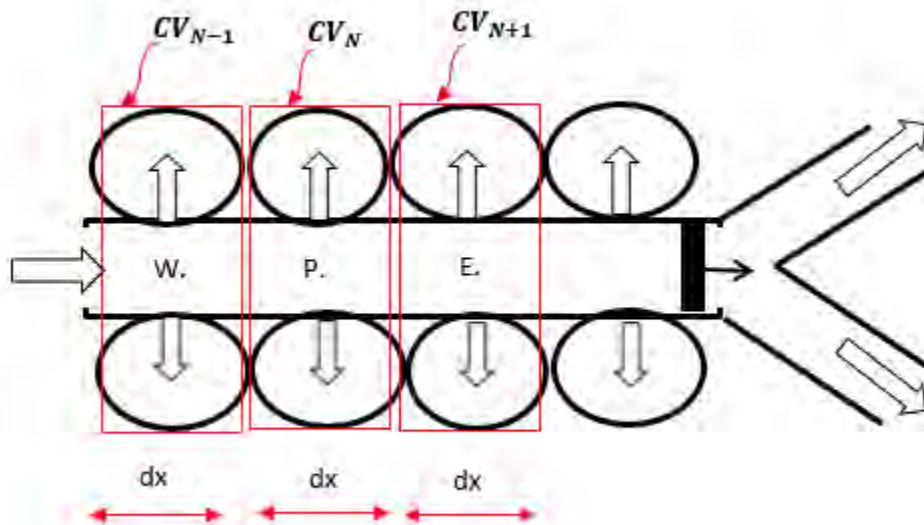
$$a_P^n = \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

$$a_P = a_E + a_W + a_P^n$$

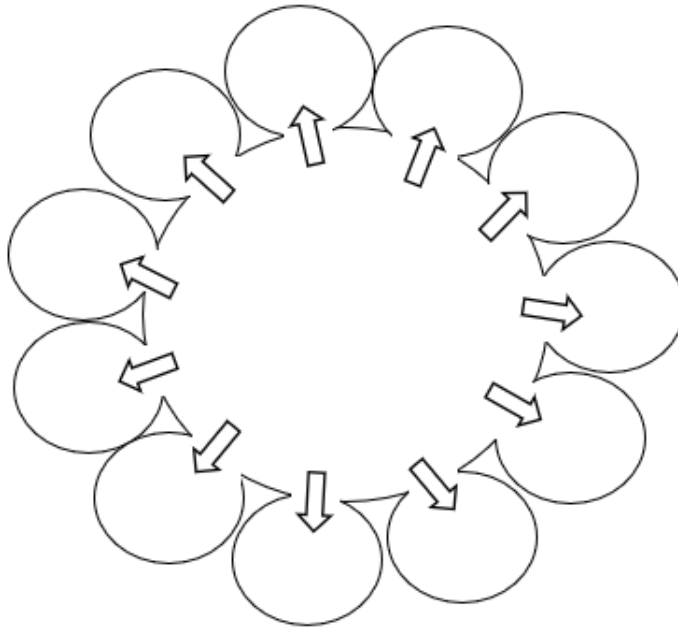
4.2 Χωρική Διακριτοποίηση

Είναι σκόπιμο να επιλεγεί ο σωστός όγκος ελέγχου για την διακριτοποίηση των εξισώσεων διατήρησης μάζας του αερολύματος που παρουσιάστηκαν σε προηγούμενα κεφάλαια. Στο σχήμα 4.2 παρουσιάζεται ο αεραγωγός με τοποθετημένες και στις δύο πλευρές του, κυψελίδες σφαιρικού σχήματος. Το μήκος dx του κάθε όγκου ελέγχου, ισούται ουσιαστικά με τη διάμετρο μίας κυψελίδας, για την οποία θεωρούμε ότι είναι 200 μm . Επίσης, σύμφωνα με πειραματικές μελέτες μπορούμε να θεωρήσουμε ότι όλες οι κυψελίδες όλων των γενεών έχουν την ίδια τιμή διαμέτρου.

Η εγκάρσια τομή του εικονιζόμενου όγκου ελέγχου έχει τη μορφή δακτυλίου ο οποίος φέρει στην περιμέτρώ του κυψελίδες που εφάπτονται με τρόπο τέτοιο, ώστε να περιβάλλουν όλη τη περιμέτρο του αεραγωγού όπως παρουσιάζεται στο σχήμα 4.3.



Σχήμα 4.2: Παρουσίαση του πεπερασμένου όγκου ελέγχου σε μορφή δακτυλίων κατά τη διαδικασία της εισπνοής, για τα σημεία W,P,E.



Σχήμα 4.3: Εγκάρσια τομή του όγκου ελέγχου κατά τη διαδικασία της εισπνοής που έχει τη μορφή δακτυλίου, ο οποίος φέρει στη περιμέτρο του τις κυψελίδες σφαιρικού σχήματος.

Ακόμα, είναι σημαντικό να τονιστεί ότι στον όγκο ελέγχου που παρουσιάζεται στο σχήμα 4.3 όλες οι κυψελίδες που βρίσκονται στη περιφέρεια έχουν την ίδια συγκέντρωση $c_{a,p}$, για την περίπτωση που ο όγκος ελέγχου βρίσκεται στο τυχαίο σημείο P όπως φαίνεται στη πλάγια όψη του στο σχήμα 4.2, σε αντίθεση με το κέντρο του δακτυλίου το οποίο βρίσκεται στο σημείο P και έχει συγκέντρωση c_p .

Οι εξισώσεις διατήρησης μάζας του αερολύματος που αποδείχθηκαν στα κεφάλαια 3.7.1 και 3.7.2 για εισπνοή στους αεραγωγούς και τις κυψελίδες αντίστοιχα, φανερώνουν ότι το πρόβλημα που εξετάζουμε είναι μονοδιάστατο ως προς τη χωρική κατεύθυνση x που είναι το βάθος το οποίο ξεκινάει να μετράει από την είσοδο της τραχείας ($x=0$) δηλαδή τη μηδενική ($z=0$) γενιά των αεραγωγών. Με βάση το τροποποιημένο μοντέλο του Weibel (Weibel, Sapovale, & Filoche, 2005) που αναφέρθηκε στη παράγραφο 3.2, οι γενιές z , από τη μηδενική έως την εικοστή τρίτη, έχουν διαφορετικά μήκη αεραγωγών l_z με αποτέλεσμα να αλλάζει ο τρόπος διακριτοποίησης της κάθε γενιάς.

Με βάση τον τρόπο μοντελοποίησης των πεπερασμένων όγκων ελέγχου που επίλεξαμε για το συγκεκριμένο πρόβλημα (όπως αναφέρθηκε στην εισαγωγή του κεφαλαίου), θα πρέπει να υπολογίσουμε τον αριθμό των κυψελίδων n_l που υπάρχουν στο μήκος του αεραγωγού (Σχήμα 4.2) και τον αντίστοιχο αριθμό n_s που υπάρχουν στην περιφέρεια του αεραγωγού (Σχήμα 4.3). Επομένως, το γινόμενο $n = n_l * n_s$ θα είναι ο συνολικός αριθμός των κυψελίδων που υπάρχουν στον αεραγωγό της γενιάς z (με $z \geq 15$) και αντίστοιχα ο συνολικός αριθμός των κυψελίδων σε όλη τη γενιά θα είναι $N = N_{a,z} = 2^z * n_l * n_s$.

Σύμφωνα με το σχήμα 3.3 οι γενιές 15 έως και 17 έχουν αραιή διάταξη κυψελίδων, επομένως οι δακτύλιοι θα έχουν αραιά τοποθετημένες τις κυψελίδες στην περιφέρειά τους και αντίστοιχα θα υπάρχουν αραιά τοποθετημένοι δακτύλιοι στο μήκος του αεραγωγού. Επομένως, σύμφωνα με τον πίνακα 3.2 πήραμε τα πειραματικά δεδομένα που αφορούν το μοντέλο του Weibel A και υπολογίσαμε σε υπολογιστικό φύλλο excel, για τις γενιές που περιέχουν κυψελίδες, τους αριθμούς n_l, n_s, n, N .

Με βάση τις σχέσεις που παρουσιάσαμε στο κεφάλαιο 3.2 μπορούμε να υπολογίσουμε τον αριθμό των κυψελίδων ανά αεραγωγό σύμφωνα με τη παρακάτω σχέση :

$$n_{a \text{ per pipe}} = n = \frac{V_{a,z}}{2^z V_{1a}}$$

Ο αριθμός των κυψελίδων ανά μήκος του αεραγωγού είναι :

$$n_l = \frac{l_p}{d_a}$$

Ο αριθμός των κυψελίδων ανά περιφέρεια του αεραγωγού είναι :

$$n_s = \frac{n}{n_l}$$

Με βάση τους παραπάνω τύπους υπολογίζουμε για τις γενιές που υπάρχουν κυψελίδες τους αριθμούς n_l, n_s, n, N με τα νούμερα να παρουσιάζονται στρογγυλοποιημένα στον πίνακα 4.1.

Πίνακας 4.1: Ο αριθμός των κυψελίδων που υπάρχουν στο μήκος και στην περιφέρεια ενός αεραγωγού γενιάς z , συνολικά σε όλο τον αεραγωγό και συνολικά στη γενιά z .

z	n_l	n_s	n	N
15	8	4	32	1048576
16	7	6	42	2752512
17	6	10	60	7864320
18	5	13	65	17039360
19	4	13	52	27262976
20	3	11	33	34603008
21	3	11	33	69206016
22	3	11	33	138412032
23	2	11	22	184549376
Sum				4.83E+08

Καταλήγουμε λοιπόν στο συμπέρασμα, ότι ο αριθμός των κυψελίδων που υπάρχει ανά μήκος, n_l , δείχνει τον αριθμό των κόμβων που έχουμε ανά αεραγωγό. Όπως συζητήθηκε στη παράγραφο 3.3 επειδή έχουμε βασίσει την ανάλυσή μας στο μοντέλο της τρομπέτας (Trumpet model), θα υπάρχει συμμετρία μεταξύ των αεραγωγών της κάθε γενιάς με αποτέλεσμα ο αριθμός των κόμβων διακριτοποίησης να είναι ο ίδιος για κάθε αεραγωγό της ίδιας γενιάς.

Για τις γενιές που δεν περιέχουν κυψελίδες ($0 \leq z \leq 14$), χωρίζουμε το μήκος l_z του κάθε αεραγωγού, και επομένως ολόκληρη τη γενιά λόγω της συμμετρίας που υπάρχει, της κάθε γενιάς σε N ίσα διαστήματα μήκους Δx_z και σαν αποτέλεσμα έχουμε $N+1$ κόμβους.

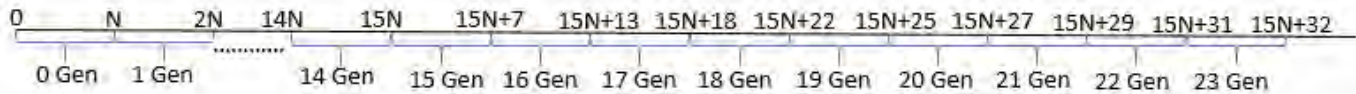
Το μήκος του κάθε διαστήματος υπολογίζεται σύμφωνα με τον παρακάτω τύπο :

$$\Delta x_z = \frac{l_z}{N}$$

Όπως περιγράφηκε στο κεφάλαιο 3.2 και από τον πίνακα 3.2 είναι φανερό ότι το μήκος των αεραγωγών διαφοροποιείται από γενιά σε γενιά, ενώ ο αριθμός των διαστημάτων N που τις χωρίζουμε παραμένει σταθερός. Σαν αποτέλεσμα συμπεραίνουμε ότι το Δx_z μεταβάλλεται όταν αλλάζει η γενιά.

Επομένως, χωρίζοντας την καθεμία από τις 14 γενιές σε N ίσα διαστήματα, σημαίνει ότι συνολικά θα έχουμε $15N+1$ κόμβους. Επίσης, για καθεμία από τις γενιές αεραγωγών με κυψελίδες γνωρίζουμε τον αριθμό των διαστημάτων που χωρίζονται που είναι $n_i - 1$, όπως φαίνεται από τον πίνακα 4.1. Έτσι λοιπόν για όλες τις γενιές θα έχουμε $(15N+1)+31$, δηλαδή $15N+32$ κόμβους που παρουσιάζονται αναλυτικά στο σχήμα 4.4 και συνολικά θα έχουμε $15N+33$ κόμβους.

Στην συνέχεια, με τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων, θα διακριτοποιήσουμε αριθμητικά τις εξισώσεις διατήρησης μάζας του αερολύματος στους αεραγωγούς και στις κυψελίδες κατά τη διαδικασία της εισπνοής και της εκπνοής με βάση τον όγκο ελέγχου που παρουσιάστηκε παραπάνω.



Σχήμα 4.4: Παρουσίαση της χωρικής διακριτοποίησης για όλες τις γενιές αεραγωγών.

4.2.1 Χρονική Διακριτοποίηση

Για τη χρονική διακριτοποίηση του προβλήματός μας, θεωρούμε τα μεγέθη T_{inh} και T_{exh} , δηλαδή τη χρονική διάρκεια της εισπνοής και της εκπνοής, αντίστοιχα. Το άθροισμά τους ισούται με τη συνολική διάρκεια του κύκλου αναπνοής (period of breathing cycle), T , όπου:

$$T = T_{\text{inh}} + T_{\text{exh}}$$

Η χρονική διάρκεια της εισπνοής (inhalation) ορίζεται για $t \in [0, T_{\text{inh}}]$, ενώ η χρονική διάρκεια της εκπνοής (exhalation) για $t \in [T_{\text{inh}}, T]$. Καθένα από τα διαστήματα $[0, T_{\text{inh}}]$ και $[T_{\text{inh}}, T]$ χωρίζεται σε M τμήματα, οπότε έχουμε $M+1$ χρονικούς κόμβους σε κάθε τμήμα. Επομένως, το χρονικό βήμα για την περίοδο της εισπνοής (Δt_1) και της εκπνοής (Δt_2) ορίζονται ως εξής:

$$\Delta t_1 = \frac{T_{\text{inh}}}{M}$$

$$\Delta t_2 = \frac{T_{\text{exh}}}{M}$$

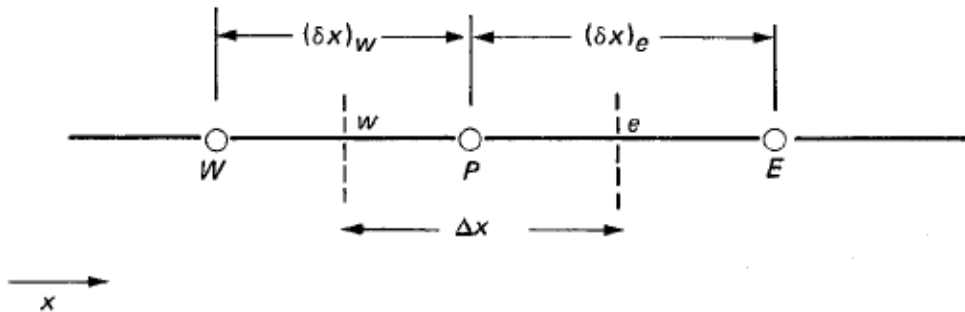
4.3 Εισπνοή

4.3.1 Εισπνοή στους αεραγωγούς

Η εξίσωση διατήρησης μάζας του αερολύματος στους αεραγωγούς όπως αποδείξαμε στα κεφάλαια 3.7.1 και 3.7.2 είναι:

$$\frac{\partial}{\partial t}(cA) = -\frac{\partial}{\partial x}(cQ) + \frac{\partial}{\partial x}\left(AD_{\text{eff}}\frac{\partial c}{\partial x}\right) - \left(\frac{Q_{a,z} + Q_{P,t,z}}{l_z}\right)c + \left(\frac{\beta\gamma_z V_{a,z}}{l_z}\right)c_{a,z} \quad (4.18)$$

Η εξίσωση 4.18 θα διακριτοποιηθεί με βάση τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου, σε όγκο ελέγχου που θα έχει τη μορφή του σχήματος 4.1 το οποίο παρατίθεται παρακάτω για να διευκολυνθεί η διακριτοποίηση.



Σχήμα 4.1: Όγκος ελέγχου μήκους Δx στον οποίο θα βασιστεί η διακριτοποίηση των εξισώσεων μεταφοράς μάζας για την εισπνοή και την εκπνοή (Patankar, 1980).

Όπως αναφέραμε στην εισαγωγή και με βάση το σχήμα 4.2 οι τρεις κόμβοι που παρουσιάζονται είναι οι αντίστοιχοι που παρουσιάζονται στο σχήμα 4.1, δηλαδή τα σημεία W,P,E τα οποία τοποθετούνται στο κέντρο ενός δακτυλίου μήκους Δx (ή dx). Τα σύνορα του πεπερασμένου όγκου ελέγχου βρίσκονται στα σημεία w και e που είναι τα πρόσωπα του όγκου ελέγχου όπως φαίνεται και από το σχήμα 4.1.

Το κέντρο ενός μεσαίου όγκου ελέγχου που βρίσκεται στο σημείο P απέχει από τα κέντρα των διπλανών όγκων ελέγχου που βρίσκονται στα σημεία W και E απόσταση $(\delta x)_w$ και $(\delta x)_e$ αντίστοιχα. Επομένως, για τη διατομή του αεραγωγού A_z ο πεπερασμένος όγκος ελέγχου είναι $V_z = A_z \Delta x$ για τον οποίο θα πρέπει να ισχύει η εξίσωση διατήρησης μάζας (εξίσωση 4.18). Είναι σημαντικό να τονιστεί ότι η εξίσωση 4.18 ισχύει για κάθε πεπερασμένο όγκο ελέγχου, διότι σε διαφορετική

περίπτωση η εξίσωση διατήρησης μάζας δεν θα ίσχυε για όλους τους αεραγωγούς των γενεών z.

Επομένως, αφού ορίσαμε τον όγκο ελέγχου στο πρόβλημα που εξετάζουμε, με βάση τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου που αναφέραμε συνοπτικά στη παράγραφο 4.1 θα ολοκληρώσουμε την εξίσωση 4.18 στο όγκο ελέγχου που παρουσιάζεται στο σχήμα 4.1 και λαμβάνουμε το παρακάτω αποτέλεσμα :

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (cA) dt dx = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \left[-\frac{\partial}{\partial x} (cQ) + \frac{\partial}{\partial x} \left(AD_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x} \right) - \left(\frac{Q_{a,z} + QP_{t,z}}{l_z} \right) c + \left(\frac{\beta \gamma_z V_{a,z}}{l_z} \right) c_{a,z} \right] dt dx \quad (4.19)$$

Θα υπολογίσουμε ξεχωριστά τα ολοκληρώματα της εξίσωσης 4.19 όπως θα φανεί παρακάτω και στη συνέχεια θα τα εισάγουμε όλα πίσω στην εξίσωση.

Για τον πρώτο όρο ολοκληρώνοντας παίρνουμε το παρακάτω αποτέλεσμα :

$$I_1 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (cA) dt dx = \int_w^e (c(t + \Delta t)A(t + \Delta t) - c(t)A(t)) dx$$

Θα συμβολίσουμε τη χρονική μεταβολή της συγκέντρωσης $c(t + \Delta t) = c^{n+1}$ και αντίστοιχα τη χρονική μεταβολή της διατομής $A(t + \Delta t) = A^{n+1}$, θεωρώντας ότι το παρόν εκφράζεται από τη χρονική στιγμή n και οι επόμενες χρονικές στιγμές την n+1. Συνεχίζοντας την ολοκλήρωση και τροποποιώντας τους συμβολισμούς όπως αναφέραμε καταλήγουμε στο παρακάτω αποτέλεσμα:

$$I_1 = (c_p^{n+1} A_p^{n+1} - c_p^n A_p^n) \Delta x \quad (a)$$

Στη συνέχεια ολοκληρώνουμε με όμοιο τρόπο και τα υπόλοιπα ολοκληρώματα έτσι ώστε να διακριτοποιηθεί πλήρως η εξίσωση.

Για τον δεύτερο όρο ισχύει :

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \left[-\frac{\partial}{\partial x} (cQ) \right] dt dx = - \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \left[\frac{\partial}{\partial x} (cQ) \right] dx dt \\ &= - \int_t^{t+\Delta t} [(cQ)_e - (cQ)_w] dt \Rightarrow \end{aligned}$$

$$I_2 = - \int_t^{t+\Delta t} [(cQ)_e] dt + \int_t^{t+\Delta t} [(cQ)_w] dt = -Q_e^{n+1} \int_t^{t+\Delta t} c_e dt + Q_w^{n+1} \int_t^{t+\Delta t} c_w dt$$

Στο παραπάνω ολοκλήρωμα θεωρήσαμε ότι η ογκομετρική παροχή Q έχει σταθερή τιμή για μεταβολή από t έως $t+\Delta t$ και επομένως ισχύει $Q^n = Q^{n+1}$. Η σταθερή τιμή της ογκομετρικής τιμής κατά τη χρονική μεταβολή οφείλεται στο γεγονός ότι το ρευστό που ρέει στους πνεύμονες, που είναι ο αέρας, μπορεί να θεωρηθεί ως ασυμπίεστο ρευστό σε πίεση 20 -25 cmH₂O που βρίσκεται.

Στην παραπάνω ολοκλήρωση έχουμε τις τιμές της συγκέντρωσης στα σύνορα του πεπερασμένου όγκου ελέγχου, γεγονός που δεν είναι βολικό διότι θέλουμε τις τιμές της στους κόμβους. Όπως αναφέρεται χαρακτηριστικά στο βιβλίο του Patankar, με την υπόθεση ότι οι τιμές στα πρόσωπα των όγκων ελέγχου είναι οι μέσες τιμές των τιμών στους κόμβους οδηγούμαστε σε αφύσικα αποτελέσματα (Patanekar1980). Σαν αποτέλεσμα, για να ξεπεραστούν οι παραπάνω δυσκολίες χρησιμοποιείται για τους όρους συναγωγής το σχήμα των ανάντη διαφορών (upwind scheme) σύμφωνα με το οποίο η τιμή στο σύνορο είναι ίση με τη τιμή στο κόμβο που βρίσκεται πιο πριν κατά τη κατεύθυνση της ροής. Στην συγκεκριμένη περίπτωση επειδή εστιάζουμε στην εισπνοή, το $F_e > 0$ και επομένως ισχύει ότι $c_e = c_P$ και $c_w = c_W$. Συνεχίζοντας την ολοκλήρωση για τον δεύτερο όρο παίρνουμε το παρακάτω αποτέλεσμα :

$$I_2 = [-Q_e^{n+1} c_P^{n+1} + Q_w^{n+1} c_W^{n+1}] \Delta t \quad (b)$$

Για τον τρίτο όρο ισχύει :

$$I_3 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} \left(AD_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x} \right) dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(AD_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x} \right) dx dt \Rightarrow$$

$$I_3 = \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(AD_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x} \right)_e - \left(AD_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x} \right)_w \right] dt \Rightarrow$$

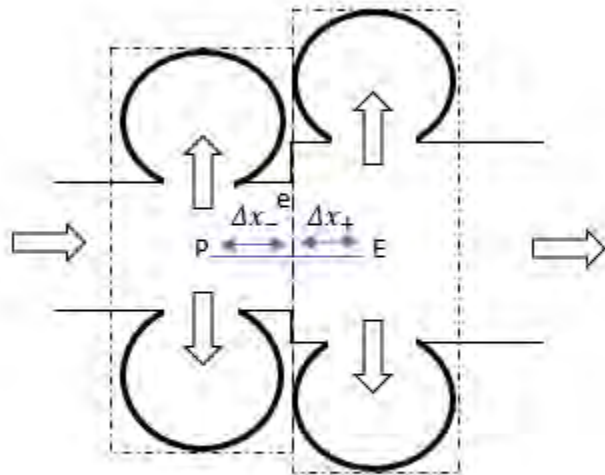
$$I_3 = A_e^{n+1} D_{\text{eff},e}^{n+1} \int_t^{t+\Delta t} \frac{c_E - c_P}{(\delta x)_e} dt - A_w^{n+1} D_{\text{eff},w}^{n+1} \int_t^{t+\Delta t} \frac{c_P - c_W}{(\delta x)_w} dt \Rightarrow$$

$$I_3 = \Delta t \left[A_e^{n+1} D_{\text{eff},e}^{n+1} \frac{c_E^{n+1} - c_P^{n+1}}{(\delta x)_e} - A_w^{n+1} D_{\text{eff},w}^{n+1} \frac{c_P^{n+1} - c_W^{n+1}}{(\delta x)_w} \right] \quad (c)$$

Είναι σημαντικό να σημειωθεί ότι για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος I_3 θεωρήθηκε ότι η διαχυτότητα έχει σταθερή τιμή για μεταβολή από t έως $t+\Delta t$ και επομένως ισχύει:

$$D_{eff,e}^n = D_{eff}^{n+1}$$

Στην περίπτωση που το σημείο P βρίσκεται πάνω στην αλλαγή γενιάς, όπως παρουσιάζεται από το σχήμα 4.5, η διακριτοποίηση για τον τρίτο όρο αλλάζει με τη διαδικασία που παρουσιάζεται παρακάτω.



Σχήμα 4.5: Παρουσιάζεται η περίπτωση όπου το σημείο P βρίσκεται στην αλλαγή γενιάς κατά την εισπνοή.

Όπως φαίνεται από το σχήμα 4.1 η απόσταση του κόμβου P από τον E είναι $(\delta x)_e$ και οι δύο κόμβοι απέχουν από το πρόσωπο του όγκου ελέγχου απόσταση Δx_+ και Δx_- . Επομένως, συνολικά ισχύει ότι $(\delta x)_e = \Delta x_+ + \Delta x_-$. Έστω N_d η μεταφορά σωματιδίων με το μηχανισμό διάχυσης και με βάση το σχήμα 4.5 μπορούμε να γράψουμε τις παρακάτω ισότητες:

$$N_d = D_{eff,e} A_e \frac{c_P - c_E}{\Delta x} = D_{eff,P} A_P \frac{c_P - c_e}{\Delta x_-} = D_{eff,E} A_E \frac{c_e - c_E}{\Delta x_+}$$

Λύνοντας ως προς τις διαφορές $c_P - c_e$ και $c_e - c_E$ βρίσκουμε τις παρακάτω σχέσεις :

$$c_P - c_e = \frac{N_d \Delta x_-}{D_{eff,P} A_P}$$

$$c_e - c_E = \frac{N_d \Delta x_+}{D_{eff,E} A_E}$$

Στην συνέχεια από το άθροισμα των διαφορών $c_P - c_e$ και $c_e - c_E$ προκύπτει η διαφορά $c_P - c_E$

$$c_P - c_e + c_e - c_E = c_P - c_E = N_d \left(\frac{\Delta x_-}{D_{eff,P} A_P} + \frac{\Delta x_+}{D_{eff,E} A_E} \right) \Rightarrow$$

$$c_P - c_E = N_d \left(\frac{\Delta x_-}{D_{eff,P} A_P} + \frac{\Delta x_+}{D_{eff,E} A_E} \right) \quad (4.20a)$$

Ο όρος $D_{eff,e} A_e$ θα υπολογιστεί στο πρόσωπο e του όγκου ελέγχου με βάση τη παρακάτω σχέση του σταθμισμένου μέσου όρου :

$$\frac{1}{D_{eff,e} A_e} = \frac{f_e}{D_{eff,E} A_E} + \frac{1 - f_e}{D_{eff,P} A_P} \quad (4.20b)$$

όπου

$$f_e = \frac{\Delta x_+}{\Delta x}$$

Για τον τέταρτο όρο ισχύει :

$$I_4 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\frac{Q_{a,z} + Q_{P,t,z}}{l_z} \right) c \right] dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \left[\left(\frac{Q_{a,z} + Q_{P,t,z}}{l_z} \right) c \right] dx dt \Rightarrow$$

$$I_4 = \Delta x \left[\int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\frac{Q_{a,z} + Q_{P,t,z}}{l_z} \right) c \right]_p dt \right] \Rightarrow$$

$$I_4 = \frac{Q_{a,p,z}^{n+1} + Q_P^{n+1} P_{t,p,z}^{n+1}}{l_{p,z}} c_P^{n+1} \Delta x \Delta t \quad (d)$$

Για τον πέμπτο όρο ισχύει :

$$I_5 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\beta \gamma_z V_{a,z}}{l_z} \right) c_{a,z} dt dx \Rightarrow$$

$$I_5 = \frac{\beta \gamma_{P,z}^{n+1} V_{a,p,z}^{n+1}}{l_{p,z}} c_{a,p}^{n+1} \Delta x \Delta t \quad (e)$$

Εισάγουμε τις εξισώσεις (a),(b),(c),(d),(e) στην εξίσωση 4.18 και έχουμε το παρακάτω αποτέλεσμα :

$$\begin{aligned} (c_P^{n+1} A_P^{n+1} - c_P^n A_P^n) \Delta x &= [-Q_e^{n+1} c_P^{n+1} + Q_w^{n+1} c_W^{n+1}] \Delta t + \\ + \Delta t \left[A_e^{n+1} D_{\text{eff},e}^{n+1} \frac{c_E^{n+1} - c_P^{n+1}}{(\delta x)_e} - A_w^{n+1} D_{\text{eff},w}^{n+1} \frac{c_P^{n+1} - c_W^{n+1}}{(\delta x)_w} \right] + \\ + \frac{Q_{a,p,z}^{n+1} + Q_P^{n+1} P_{t,p,z}^{n+1}}{l_{p,z}} c_P^{n+1} \Delta x \Delta t + \frac{\beta \gamma_{P,z}^{n+1} V_{a,p,z}^{n+1}}{l_{p,z}} c_{a,p}^{n+1} \Delta x \Delta t \quad (4.21) \end{aligned}$$

Επειδή θεωρούμε ότι τα πρόσωπα του όγκου ελέγχου βρίσκονται στη μέση της απόστασης μεταξύ των κόμβων μπορούμε να αντικαταστήσουμε το Δx από το παρακάτω τύπο:

$$\Delta x = \frac{(\delta x)_w + (\delta x)_e}{2}$$

Επομένως, η σχέση 4.21 αντικαθιστώντας το Δx σύμφωνα με τον παραπάνω τύπο και πολλαπλασιάζοντας με τον όρο $2/\Delta t$ κάθε μέλος έχουμε το παρακάτω αποτέλεσμα :

$$\begin{aligned}
& (c_P^{n+1}A_P^{n+1} - c_P^nA_P^n) \frac{(\delta x)_w + (\delta x)_e}{\Delta t} = 2[-Q_e^{n+1}c_P^{n+1} + Q_w^{n+1}c_W^{n+1}] + \\
& + 2 \left[A_e^{n+1}D_{\text{eff},e}^{n+1} \frac{c_E^{n+1} - c_P^{n+1}}{(\delta x)_e} - A_w^{n+1}D_{\text{eff},w}^{n+1} \frac{c_P^{n+1} - c_W^{n+1}}{(\delta x)_w} \right] + \\
& \frac{Q_{a,P,z}^{n+1} + Q_P^{n+1}P_{t,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} ((\delta x)_w + (\delta x)_e)c_P^{n+1} + \\
& + \frac{\beta\gamma_{P,z}^{n+1}V_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} ((\delta x)_w + (\delta x)_e)c_{a,p}^{n+1} \quad (4.22)
\end{aligned}$$

Θέτουμε τους συντελεστές των συγκεντρώσεων στην παραπάνω εξίσωση ως εξής :

$$L_1 = [A_P^{n+1} \frac{((\delta x)_w + (\delta x)_e)}{\Delta t}]$$

$$L_{1,0} = [A_P^n \frac{((\delta x)_w + (\delta x)_e)}{\Delta t}]$$

$$L_2 = [2Q_e^{n+1}, 2Q_w^{n+1}]$$

$$L_3 = [\frac{2A_e^{n+1}D_{\text{eff},e}^{n+1}}{(\delta x)_e}, \frac{2A_w^{n+1}D_{\text{eff},w}^{n+1}}{(\delta x)_w}]$$

$$L_4 = [\frac{Q_{a,P,z}^{n+1} + Q_P^{n+1}P_{t,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} ((\delta x)_w + (\delta x)_e)]$$

$$L_5 = [\frac{\beta\gamma_{P,z}^{n+1}V_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} ((\delta x)_w + (\delta x)_e)]$$

Βάζουμε τους παραπάνω συντελεστές στην εξίσωση 4.22 και έχουμε το παρακάτω αποτέλεσμα :

$$\begin{aligned} (L_1 c_P^{n+1} - L_{1,0} c_P^n) &= -L_{2,1} c_P^{n+1} + L_{2,2} c_W^{n+1} + \\ + L_{3,1} (c_E^{n+1} - c_P^{n+1}) - L_{3,2} (c_P^{n+1} - c_W^{n+1}) + L_4 c_P^{n+1} + L_5 c_{a,p}^{n+1} &\Rightarrow \\ (-L_{2,2} - L_{3,2}) c_W^{n+1} + (L_1 + L_{2,1} + L_{3,1} + L_{3,2} - L_4) c_P^{n+1} - L_{3,1} c_E^{n+1} + \\ - L_5 c_{a,p}^{n+1} &= L_{1,0} c_P^n \quad (4.23) \end{aligned}$$

Η εξίσωση 4.23 μπορεί να εκφραστεί σε πιο γενική μορφή αν αντικαταστήσουμε τους κόμβους W,P,E με τα σημεία $i-1, i, i+1$ και η νέα εξίσωση που προκύπτει είναι η εξής :

$$\begin{aligned} (-L_{2,2} - L_{3,2}) c_{i-1}^{n+1} + (L_1 + L_{2,1} + L_{3,1} + L_{3,2} - L_4) c_i^{n+1} - L_{3,1} c_{i+1}^{n+1} + \\ - L_5 c_{a,p}^{n+1} &= L_{1,0} c_i^n \quad (4.24) \end{aligned}$$

Όπως συζητήσαμε στο κεφάλαιο 4.2 που αναφέρεται στη χωρική διακριτοποίηση του προβλήματος, συνολικά για όλες τις γενιές, $0 \leq z \leq 23$, θα έχουμε $15N+33$ κόμβους. Η εξίσωση (4.24) θα εφαρμοστεί για τους ενδιάμεσους κόμβους, δηλαδή για $i=1, 2, \dots, 15N+31$. Επομένως, έχουμε $15N+31$ εξισώσεις και $15N+33$ αγνώστους. Έτσι λοιπόν, για να ισοσταθμιστεί ο αριθμός των εξισώσεων με τον αντίστοιχο των αγνώστων θα πρέπει να δοθούν στα άκρα, $x=0$ (το πρώτο σημείο διακριτοποίησης στη μηδενική γενιά, δηλαδή την τραχεία) και $x=L$ (το τελευταίο σημείο διακριτοποίησης κάθε αεραγωγού της 23ης γενιάς), οι δύο συνοριακές συνθήκες του προβλήματος.

Ξεκινώντας με τις **αρχικές συνθήκες του προβλήματος (Α.Σ.)** και υποθέτοντας ότι αρχικά δεν υπάρχει καθόλου αερόλυμα στο αναπνευστικό σύστημα ισχύει ότι $c_i(n=0) = c_i^0 = 0$ για τους ενδιάμεσους κόμβους ($i=1, 2, \dots, 15N+31$).

Οι συνοριακές συνθήκες (Σ.Σ.) του προβλήματος για τα δύο άκρα είναι :

Για το σημείο $x=0$: $c_i^0 = 1$ ή γενικά μπορούμε να πούμε ότι έχει γνωστή τιμή για όλες τις τιμές της χρονικής μεταβλητής n ($n=0, 1, 2, \dots, M$).

Για το σημείο $x=L$: Η συνολική ροή είναι μηδενική, επομένως $J=0$ που περιγράφεται από την εξίσωση 3.21a. Η συγκεκριμένη εξίσωση όπως έχουμε αναλύσει, αποτελείται από τους όρους συναγωγής και τους όρους διάχυσης. Οι όροι της

συναγωγής στο $x=L$ μηδενίζονται και είναι διαισθητικά κατανοητό διότι η ογκομετρική παροχή μηδενίζεται και επομένως και η ταχύτητα είναι μηδέν. Οι όροι της διάχυσης θα πρέπει να είναι εξίσου μηδέν στο $x=L$, γεγονός που θεωρούμε ότι ισχύει καθώς αγνοούμε τις μικρές αποθέσεις που υπάρχουν στο τέλος $x=L$ με μικρό σφάλμα.

Άρα, επειδή $J=0$ από την 3.21a θα πρέπει να ισχύει ότι $(D_a \vec{\nabla} c)_{x=L} = 0 \Rightarrow$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{x=L} = 0$$

Με την υπόθεση ότι ο τελευταίος κόμβος επηρεάζεται από τους κόμβους που βρίσκονται πριν από αυτόν, καθώς κινούμαστε κατά τη φορά της ροής, χρησιμοποιούμε ανάδρομες (backward) εκφράσεις πεπερασμένων διαφορών και σαν αποτέλεσμα έχουμε :

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{x=L} = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{3c_{15N+32} - 4c_{15N+31} + c_{15N+30}}{2\Delta x} = 0 \Rightarrow$$

$$3c_{15N+32} - 4c_{15N+31} + c_{15N+30} = 0$$

Έτσι λοιπόν, με χρήση της τελευταίας εξίσωσης που προκύπτει από τη συνοριακή συνθήκη στο $x=L$, έχουμε μία επιπλέον εξίσωση με αποτέλεσμα τελικά συνολικά να έχουμε $15N+32$ εξισώσεις. Ακόμα, από τη συνοριακή συνθήκη στο $x=0$ είναι γνωστές οι συγκεντρώσεις σε εκείνο το σημείο και τελικά οι άγνωστοι μειώνονται σε $15N+32$, με αποτέλεσμα το σύστημα $(15N+32) \times (15N+32)$ να μπορεί να επιλυθεί.

4.3.2 Εισπνοή στις κυψελίδες

Η εξίσωση διατήρησης μάζας του αερολύματος στις αεραγωγούς όπως αναφέραμε είναι η παρακάτω

$$\frac{\partial}{\partial t}(V_{a,z}c_{a,z}) = \left(\frac{f_z Q P_{t,z}}{l_z} + \frac{Q_{a,z}}{l_z}\right)\Delta x_z c - \gamma_z V_{a,z}c_{a,z} \quad (4.25)$$

η οποία θα διακριτοποιηθεί με βάση τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου με όμοιο τρόπο όπως στους αεραγωγούς σε όγκο ελέγχου που θα έχει τη μορφή του σχήματος 4.1. Ολοκληρώνουμε την εξίσωση 4.25 στο όγκο ελέγχου και λαμβάνουμε το παρακάτω αποτέλεσμα :

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t}(V_{a,z}c_{a,z}) dt dx = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\frac{f_z Q P_{t,z}}{l_z} + \frac{Q_{a,z}}{l_z}\right)\Delta x_z c - \gamma_z V_{a,z}c_{a,z} \right] dt dx \quad (4.26)$$

Θα υπολογίσουμε ξεχωριστά τα ολοκληρώματα της εξίσωσης 4.26 όπως θα φανεί παρακάτω και στη συνέχεια θα τα εισάγουμε όλα πίσω στην εξίσωση.

Για τον πρώτο όρο ολοκληρώνοντας παίρνουμε το παρακάτω αποτέλεσμα :

$$I_1 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t}(V_{a,z}c_{a,z}) dt dx = \int_w^e V_{a,p}^{n+1}(c_{a,p}^{n+1} - c_{a,p}^n) dx \Rightarrow$$

$$I_1 = V_{a,p}^{n+1}(c_{a,p}^{n+1} - c_{a,p}^n)\Delta x \quad (A)$$

Για τον δεύτερο όρο ισχύει :

$$I_2 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\frac{f_z Q P_{t,z}}{l_z} + \frac{Q_{a,z}}{l_z}\right)c \right] \Delta x_z dt dx \Rightarrow$$

$$I_2 = \left(\frac{f_z^{n+1} Q_P^{n+1} P_{t,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} + \frac{Q_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} \right) \Delta x_z \Delta x \Delta t c_P^{n+1} \quad (B)$$

Για τον τρίτο όρο ισχύει :

$$I_3 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} [\gamma_z V_{a,z} c_{a,z}] dt dx \Rightarrow$$

$$I_3 = \gamma_P^{n+1} V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} \Delta x \Delta t \quad (C)$$

Εισάγουμε τις εξισώσεις (A),(B),(C) στην εξίσωση 4.26 και έχουμε το παρακάτω αποτέλεσμα :

$$V_{a,p}^{n+1} (c_{a,p}^{n+1} - c_{a,p}^n) \Delta x = \left(\frac{f_z^{n+1} Q_P^{n+1} P_{t,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} + \frac{Q_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} \right) \Delta x_z \Delta x \Delta t c_P^{n+1} +$$

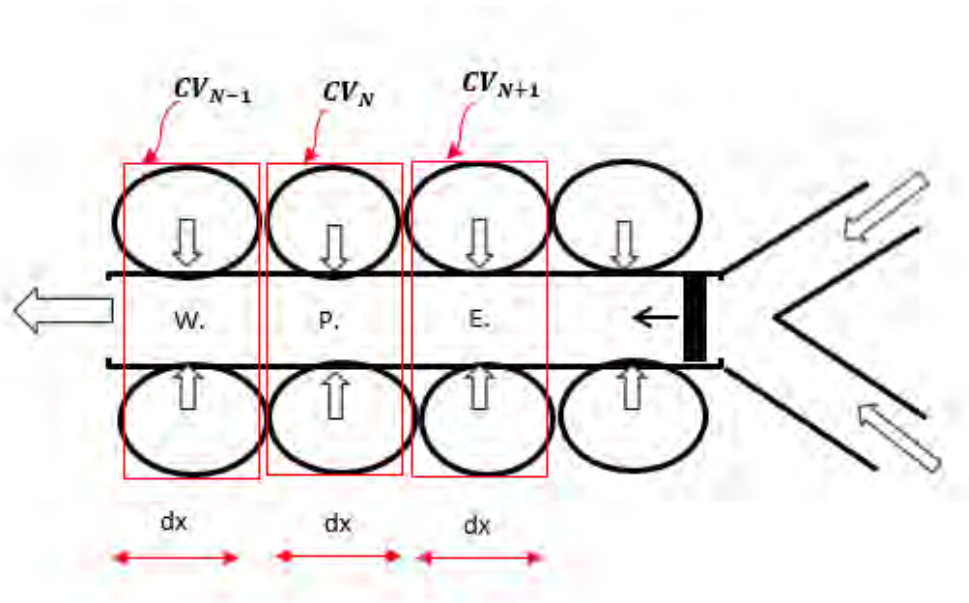
$$+ \gamma_P^{n+1} V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} \Delta x \Delta t \Rightarrow$$

$$c_{a,P}^{n+1} \left(\frac{V_{a,p}^{n+1}}{\Delta t} - \gamma_P^{n+1} V_{a,P}^{n+1} \right) - \left(\frac{f_z^{n+1} Q_P^{n+1} P_{t,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} + \frac{Q_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} \right) \Delta x_z c_P^{n+1} =$$

$$= \frac{V_{a,p}^{n+1}}{\Delta t} c_{a,P}^n$$

4.4 Εκπνοή

Κατά την εκπνοή, η ροή του αερολύματος γίνεται από τις κυψελίδες προς τους αεραγωγούς του πνεύμονα. Έτσι, σύμφωνα με τον θετικά ορισμένο άξονα x , οι ποσότητες των Q και $Q_{a,z}$ θα είναι αρνητικές. Η ροή του αερολύματος σε μία γενιά φαίνεται και στους όγκους ελέγχου του σχήματος 4.6 και 4.7, αντιστοιχεί με εκείνους για την εισπνοή.



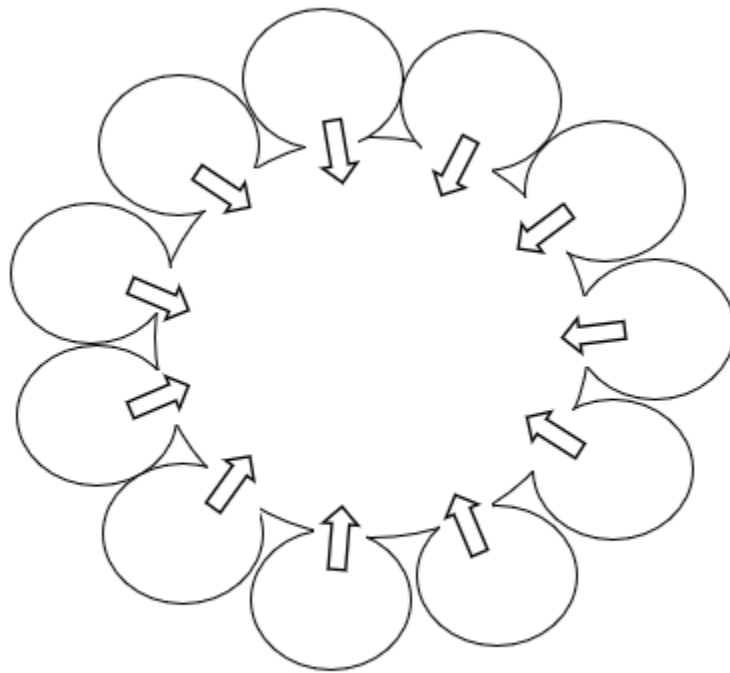
Σχήμα 4.6: Πεπερασμένος όγκος ελέγχου σε μορφή δακτυλίων κατά τη διαδικασία της εκπνοής, για τα σημεία W, P, E .

Όπως περιγράφηκε και στο κεφάλαιο «4.3 Εισπνοή», στην παράπλευρη επιφάνεια του αγωγού προκαλείται ροή είτε λόγω ροής σωματιδίων από τις κυψελίδες προς τους αεραγωγούς είτε λόγω εναπόθεσης σωματιδίων στην παράπλευρη επιφάνειά του.

Επομένως, η συνολική εκροή της παράπλευρης επιφάνειας για ένα διαφορικό μήκος dx ισούται με:

$$dG_{ex} = -\frac{|Q_{a,z}|c_{a,z}}{l_z} dx + P_{t,z} \frac{|Q(x)|c(x)}{l_z} dx$$

Το αρνητικό πρόσημο του πρώτου όρου προκύπτει καθώς σε αυτή την περίπτωση, η ροή από τις κυψελίδες θεωρείται ως εισροή για τον αεραγωγό. Είναι φανερό ότι η σχέση 3.15 που αναφέρθηκε στο κεφάλαιο 3.7 είναι ίση και αντίθετη με τη παραπάνω σχέση και επομένως ισχύει ότι $dG_{inh} = -dG_{ex}$.



Σχήμα 4.7: Εγκάρσια τομή του όγκου ελέγχου κατά τη διαδικασία της εισπνοής που έχει τη μορφή δακτυλίου, ο οποίος φέρει στη περίμετρο του τις κυψελίδες σφαιρικού σχήματος.

4.4.1 Εκπνοή στους αεραγωγούς

Η εξίσωση διατήρησης μάζας του αερολύματος στους αεραγωγούς, θα είναι ίδια με εκείνη που διατυπώθηκε στο κεφάλαιο «3.7 Εισπνοή», με τη μόνη διαφορά ότι στην εκπνοή, ο πρώτος όρος της ροής δια της παράπλευρης επιφάνειας, θα έχει αντίθετο πρόσημο.

Επομένως για το σύστημα των αεραγωγών, το ισοζύγιο διατήρησης μάζας κατά την εκπνοή, ισούται με:

$$\frac{\partial}{\partial t}(cA) = -\frac{\partial}{\partial x}(cQ) + \frac{\partial}{\partial x}\left(AD_{eff}\frac{\partial c}{\partial x}\right) + \frac{|Q_{a,z}|c_{a,z}}{l_z} - \left(\frac{|Q|P_{t,z}}{l_z}\right)c + b\frac{L_{a,z}}{l_z} \quad (4.27)$$

Η διακριτοποίηση της εξίσωσης θα γίνει με ακριβώς τον ίδιο τρόπο όπως στην εισπνοή, και χρησιμοποιώντας και πάλι το σχήμα 4.1. Ολοκληρώνοντας κάθε μέλος της εξίσωσης 4.27, λαμβάνουμε το εξής αποτέλεσμα,

$$\int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t}(cA) dt dx = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \left[-\frac{\partial}{\partial x}(cQ) + \frac{\partial}{\partial x}\left(AD_{eff}\frac{\partial c}{\partial x}\right) + \frac{|Q_{a,z}|c_{a,z}}{l_z} - \left(\frac{|Q|P_{t,z}}{l_z}\right)c + \left(\frac{\beta\gamma_z V_{a,z}}{l_z}\right)c_{a,z}\right] dt dx \quad (4.28)$$

Καθ' όμοιο τρόπο, θα υπολογίσουμε κάθε ολοκλήρωμα ξεχωριστά, και θα το αντικαταστήσουμε στο τέλος στην παραπάνω εξίσωση (4.29)

$$I_1 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t}(cA) dt dx = \int_w^e (A^{n+1}c^{n+1} - A^n c^n) dx \Rightarrow$$

$$I_1 = (A_p^{n+1}c_p^{n+1} - A_p^n c_p^n)\Delta x \quad (a)$$

$$I_2 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} -\frac{\partial}{\partial x}(cQ) dt dx = -\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x}(cQ) dx dt \Rightarrow$$

$$I_2 = -\int_t^{t+\Delta t} [(cQ)_e - (cQ)_w] dt = (-Q_e^{n+1}c_E^{n+1} + Q_w^{n+1}c_P^{n+1})\Delta t \quad (b)$$

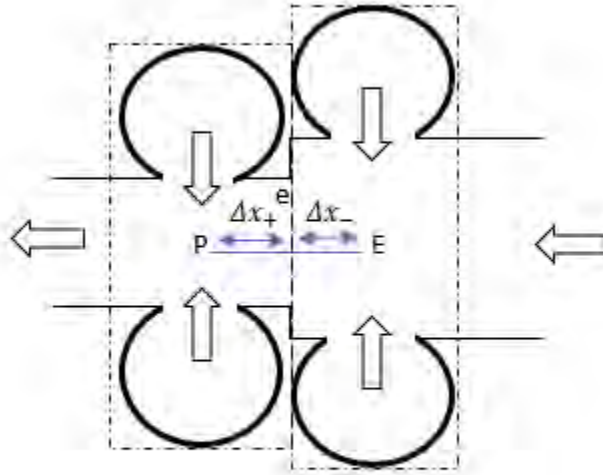
όπου το c_p στο τελικό αποτέλεσμα προκύπτει από το upwind σχήμα, καθώς κατά την πορεία της ροής, το μέτωπο w είναι πιο κοντά στον κόμβο P . Επομένως $c_w = c_p$.

$$I_3 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} (AD_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x}) dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} (AD_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x}) dx dt$$

$$\Rightarrow I_3 = \int_t^{t+\Delta t} [(AD_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x})_e - (AD_{\text{eff}} \frac{\partial c}{\partial x})_w] dt$$

$$\Rightarrow I_3 = A_e^{n+1} D_{\text{eff},e}^{n+1} \int_t^{t+\Delta t} \frac{c_E - c_P}{(\delta x)_e} dt - A_w^{n+1} D_{\text{eff},w}^{n+1} \int_t^{t+\Delta t} \frac{c_P - c_W}{(\delta x)_w} dt$$

$$\Rightarrow I_3 = \left[A_e^{n+1} D_{\text{eff},e}^{n+1} \frac{c_E^{n+1} - c_P^{n+1}}{(\delta x)_e} - A_w^{n+1} D_{\text{eff},w}^{n+1} \frac{c_P^{n+1} - c_W^{n+1}}{(\delta x)_w} \right] \Delta t \quad (c)$$



Σχήμα 4.8: Παρουσιάζεται η περίπτωση όπου το σημείο P βρίσκεται στην αλλαγή γενιάς κατά την εκπνοή.

Με όμοιο τρόπο όπως και στην εισπνοή, στο σχήμα 4.8 φαίνεται η περίπτωση που το σημείο P βρίσκεται πάνω στην αλλαγή γενιάς και μπορούμε να γράψουμε τις παρακάτω ισότητες:

$$N_d = D_{\text{eff},e} A_e \frac{c_P - c_E}{\Delta x} = D_{\text{eff},P} A_P \frac{c_P - c_e}{\Delta x_+} = D_{\text{eff},E} A_E \frac{c_e - c_E}{\Delta x_-}$$

Με όμοιο τρόπο λύνουμε από τις παραπάνω ισότητες ως προς τις διαφορές $c_P - c_e$ και $c_e - c_E$ βρίσκουμε τις παρακάτω σχέσεις :

$$c_P - c_e = \frac{N_d \Delta x_+}{D_{eff,P} A_P}$$

$$c_e - c_E = \frac{N_d \Delta x_-}{D_{eff,E} A_E}$$

Στην συνέχεια αθροίζουμε και προκύπτει η διαφορά $c_P - c_E$

$$c_P - c_e + c_e - c_E = c_P - c_E = N_d \left(\frac{\Delta x_+}{D_{eff,P} A_P} + \frac{\Delta x_-}{D_{eff,E} A_E} \right) \Rightarrow$$

$$c_P - c_E = N_d \left(\frac{\Delta x_+}{D_{eff,P} A_P} + \frac{\Delta x_-}{D_{eff,E} A_E} \right)$$

Όπου πάλι ο όρος $D_{eff,e} A_e$ θα υπολογιστεί στο πρόσωπο e του όγκου ελέγχου με βάση τη παρακάτω σχέση του σταθμισμένου μέσου όρου χρησιμοποιώντας τον συντελεστή $f_e = \frac{\Delta x_+}{\Delta x}$ για τις αποστάσεις:

$$\frac{1}{D_{eff,e} A_e} = \frac{f_e}{D_{eff,E} A_E} + \frac{1 - f_e}{D_{eff,P} A_P}$$

$$I_4 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \left[\frac{|Q_{a,z}| c_{a,z}}{l_z} - \left(\frac{|Q| P_{t,z}}{l_z} \right) c \right] dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \left[\frac{|Q_{a,z}| c_{a,z}}{l_z} - \left(\frac{|Q| P_{t,z}}{l_z} \right) c \right] dx dt$$

$$\Rightarrow I_4 = \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\frac{|Q_{a,z}| c_{a,z}}{l_z} - \frac{|Q_P| P_{t,z}}{l_z} c_P \right) \Delta x \right] dt$$

$$\Rightarrow I_4 = \left(\frac{|Q_{a,P,z}|^{n+1}}{l_{P,z}} c_{a,P,z}^{n+1} - \frac{|Q_P|^{n+1} P_{t,P,z}}{l_{P,z}} c_P^{n+1} \right) \Delta x \Delta t \text{ (d)}$$

$$I_5 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\beta \gamma_z V_{a,z}}{l_z} \right) c_{a,z} dt dx = \frac{\beta \gamma_{P,z}^{n+1} V_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} c_{a,P}^{n+1} \Delta x \Delta t \quad (e)$$

Αντικαθιστώντας τις (a) , (b) , (c) , (d) , (e) στην (4.28) έχουμε για τους αεραγωγούς τη **διακριτοποιημένη** εξίσωση διατήρησης μάζας για την εκπονή,

$$\begin{aligned} (A_P^{n+1} c_P^{n+1} - A_P^n c_P^n) \Delta x &= (-Q_e^{n+1} c_E^{n+1} + Q_w^{n+1} c_P^{n+1}) \Delta t + \\ &+ \left[A_e^{n+1} D_{\text{eff},e}^{n+1} \frac{c_E^{n+1} - c_P^{n+1}}{(\delta x)_e} - A_w^{n+1} D_{\text{eff},w}^{n+1} \frac{c_P^{n+1} - c_W^{n+1}}{(\delta x)_w} \right] \Delta t + \\ &+ \left(\frac{|Q_{a,P,z}|^{n+1}}{l_{P,z}} c_{a,z}^{n+1} - \frac{|Q_P|^{n+1} P_{t,P,z}}{l_{P,z}} c_P^{n+1} \right) \Delta x \Delta t \\ &+ \frac{\beta \gamma_{P,z}^{n+1} V_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} \Delta x \Delta t c_{a,P}^{n+1} \quad (4.28) \end{aligned}$$

Αντίστοιχα με την εισπονή, γίνεται η αντικατάσταση,

$$\Delta x = \frac{(\delta x)_w + (\delta x)_e}{2}$$

Έτσι, αντικαθιστώντας το Δx και πολλαπλασιάζοντας κάθε όρο με $\frac{2}{\Delta t}$, η (4.29) μετασχηματίζεται ως εξής,

$$\begin{aligned} (A_P^{n+1} c_P^{n+1} - A_P^n c_P^n) \frac{(\delta x)_w + (\delta x)_e}{\Delta t} &= 2(-Q_e^{n+1} c_E^{n+1} + Q_w^{n+1} c_P^{n+1}) + \\ &+ 2 \left[A_e^{n+1} D_{\text{eff},e}^{n+1} \frac{c_E^{n+1} - c_P^{n+1}}{(\delta x)_e} - A_w^{n+1} D_{\text{eff},w}^{n+1} \frac{c_P^{n+1} - c_W^{n+1}}{(\delta x)_w} \right] + \\ &+ \frac{|Q_{a,P,z}|^{n+1}}{l_{P,z}} ((\delta x)_w + (\delta x)_e) c_{a,P}^{n+1} - \frac{|Q_P|^{n+1} P_{t,P,z}}{l_{P,z}} ((\delta x)_w + (\delta x)_e) c_P^{n+1} \\ &+ \frac{\beta \gamma_{P,z}^{n+1} V_{a,P,z}^{n+1}}{l_{P,z}} ((\delta x)_w + (\delta x)_e) c_{a,P}^{n+1} \quad (4.30) \end{aligned}$$

Στη συνέχεια, θέτουμε τους συντελεστές των συγκεντρώσεων:

$$L_1 = [A_P^{n+1} \frac{((\delta x)_w + (\delta x)_e)}{\Delta t}]$$

$$L_{1,0} = [A_P^n \frac{((\delta x)_w + (\delta x)_e)}{\Delta t}]$$

$$L_2 = [2Q_e^{n+1}, 2Q_w^{n+1}]$$

$$L_3 = [\frac{2A_e^{n+1} D_{\text{eff},e}^{n+1}}{(\delta x)_e}, \frac{2A_w^{n+1} D_{\text{eff},w}^{n+1}}{(\delta x)_w}]$$

$$L_4 = [\frac{|Q_{a,p,z}|^{n+1}}{l_{p,z}} ((\delta x)_w + (\delta x)_e)]$$

$$L_5 = [\frac{|Q_p|^{n+1} P_{t,p,z}}{l_{p,z}} ((\delta x)_w + (\delta x)_e)]$$

$$L_6 = [(\frac{\beta \gamma_z^{n+1} V_{a,z}^{n+1}}{l_z})_P ((\delta x)_w + (\delta x)_e)]$$

Χρησιμοποιώντας αυτούς τους συντελεστές στην (4.30), έχουμε,

$$L_1 c_P^{n+1} - L_{1,0} c_P^n = -L_{2,1} c_E^{n+1} + L_{2,2} c_P^{n+1} + L_{3,1} c_E^{n+1} - (L_{3,1} + L_{3,2}) c_P^{n+1} + \\ + L_{3,2} c_W^{n+1} + L_4 c_{a,p}^{n+1} - L_5 c_P^{n+1} + L_6 c_{a,p}^{n+1}$$

Και ομαδοποιώντας τους όρους:

$$-L_{3,2} c_W^{n+1} + (L_1 - L_{2,2} + L_{3,1} + L_{3,2} + L_5) c_P^{n+1} + (L_{2,1} - L_{3,1}) c_E^{n+1} + \\ -(L_5 + L_6) c_{a,p}^{n+1} = L_{1,0} c_P^n$$

Για $(W \rightarrow i-1, P \rightarrow i, E \rightarrow i+1)$ έχουμε :

$$-L_{3,2} c_{i-1}^{n+1} + (L_1 - L_{2,2} + L_{3,1} + L_{3,2} + L_5) c_i^{n+1} + (L_{2,1} - L_{3,1}) c_{i+1}^{n+1} + \\ -(L_5 + L_6) c_{a,i}^{n+1} = L_{1,0} c_i^n \quad (4.31)$$

Όπως συζητήσαμε στο κεφάλαιο 4.3 που αναφέρεται στη διαδικασία της εισπνοής συνολικά για όλες τις γενιές, $0 \leq z \leq 23$, θα έχουμε $15N+33$ κόμβους. Το ίδιο ακριβώς ισχύει και για τη διαδικασία της εκπνοής και έτσι η εξίσωση(4.31) θα εφαρμοστεί για τους ενδιάμεσους κόμβους, δηλαδή για $i=1,2,\dots,15N+31$.

Επομένως, έχουμε $15N+31$ εξισώσεις και $15N+33$ αγνώστους. Έτσι λοιπόν, για να ισοσταθμιστεί ο αριθμός των εξισώσεων με τον αντίστοιχο των αγνώστων θα πρέπει να δοθούν, στα άκρα $x=0$ (το πρώτο σημείο διακριτοποίησης στη μηδενική γενιά, δηλαδή τη τραχεία) και $x=L$ (το τελευταίο σημείο διακριτοποίησης κάθε αεραγωγού της 23ης γενιάς), οι δύο συνοριακές συνθήκες του προβλήματος.

Ξεκινώντας με τις **αρχικές συνθήκες του προβλήματος (Α.Σ.)**, γνωρίζουμε τις τιμές της συγκέντρωσης στο τέλος της εισπνοής και ισχύει ότι $c_i(n = M) = c_i^M$ = γνωστή τιμή για τους ενδιάμεσους κόμβους ($i=1,2,\dots,15N+31$).

Οι συνοριακές συνθήκες (Σ.Σ.) του προβλήματος για τα δύο άκρα είναι :

Για το σημείο $x=0$: Η συνολική ροή κατά την εκροή στο άκρο $x=0$ είναι μηδενική, επομένως $J=0$ που περιγράφεται από την εξίσωση 3.21a. και θα ισχύει:

$$\left(D_d \vec{\nabla} c \right)_{x=0} = 0 \Rightarrow$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x=0} = 0 \quad (4.32)$$

Θα χρησιμοποιήσουμε πρόδρομες εκφράσεις (forward) πεπερασμένων διαφορών για την παράγωγο (4.32) με αποτέλεσμα να έχουμε τη παρακάτω έκφραση :

$$\frac{-3c_0 + 4c_1 - c_2}{2\Delta x} = 0 \Rightarrow$$

$$-3c_0 + 4c_1 - c_2 = 0 \quad (4.33a)$$

Για το σημείο $x=L$: Η συνολική ροή είναι μηδενική, επομένως $J=0$ που περιγράφεται από την εξίσωση 3.21a. Έτσι λοιπόν, όμοια όπως στη εισπνοή θα ισχύει ότι

$$\left(D_d \vec{\nabla} c \right)_{x=L} = 0 \Rightarrow$$

$$\left(\frac{\partial c}{\partial x}\right)_{x=L} = 0 \Rightarrow$$

$$\frac{3c_{15N+32} - 4c_{15N+31} + c_{15N+30}}{2\Delta x} = 0 \Rightarrow$$

$$3c_{15N+32} - 4c_{15N+31} + c_{15N+30} = 0 \quad (4.33b)$$

Έτσι λοιπόν, με χρήση της τελευταίας εξίσωσης που προκύπτει από τη συνοριακή συνθήκη στο $x=L$, έχουμε μία επιπλέον εξίσωση με αποτέλεσμα τελικά συνολικά να έχουμε $15N+32$ εξισώσεις. Ακόμα, από τη συνοριακή συνθήκη στο $x=0$ προκύπτει μία ακόμα εξίσωση και τελικά έχουμε $15N+33$ εξισώσεις. Άρα λοιπόν, το σύστημα $(15N+33) \times (15N+33)$ να μπορεί να επιλυθεί.

4.4.2 Εκπνοή στις κυψελίδες

Για τις κυψελίδες, ισχύουν και πάλι όσα περιγράφηκαν στο αντίστοιχο κεφάλαιο της εισπνοής. Η εξίσωση διατήρησης μάζας για τις κυψελίδες είναι η εξής:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{CV} c dV = [\text{εισροή}] - [\text{εκροή}] \quad (4.34)$$

Εδώ, η εισροή ισούται με τη ροή αερολύματος που προσκρούει στα τοιχώματα του αεραγωγού και εισέρχεται στις κυψελίδες. Επομένως:

$$[\text{εισροή}] = f_z \frac{P_{t,z}}{l_z} |Q| c \Delta x_z \quad (4.34a)$$

Αντίστοιχα, η εκροή ισούται με τη ροή αερολύματος από τις κυψελίδες προς τον αεραγωγό καθώς και τις εναποθέσεις των σωματιδίων στα τοιχώματα των κυψελίδων. Άρα:

$$[\text{εκροή}] = \frac{|Q_{a,z}| c_{a,z}}{l_z} \Delta x_z + \gamma_z V_{a,z} c_{a,z} \quad (4.34b)$$

Με συνδυασμό των εξισώσεων (6.15), παίρνουμε την τελική εξίσωση διατήρησης μάζας για τις κυψελίδες, ίση με:

$$\frac{\partial}{\partial t} (V_{a,z} c_{a,z}) = f_z \frac{P_{t,z}}{l_z} |Q| c \Delta x_z - \frac{|Q_{a,z}| c_{a,z}}{l_z} \Delta x_z - \gamma_z V_{a,z} c_{a,z} \quad (4.35)$$

Διακριτοποιώντας την εξίσωση ολοκληρώνουμε και τα δύο μέλη, οπότε προκύπτει,

$$\begin{aligned} & \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (V_{a,z} c_{a,z}) dt dx = \\ & = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \left[f_z \frac{P_{t,z}}{l_z} |Q| c \Delta x_z - \frac{|Q_{a,z}| c_{a,z}}{l_z} \Delta x_z - \gamma_z V_{a,z} c_{a,z} \right] dt dx \quad (4.36) \end{aligned}$$

Θα υπολογίσουμε ξεχωριστά κάθε ολοκλήρωμα και θα το αντικαταστήσουμε στην (4.36).

$$I_1 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (V_{a,z} c_{a,z}) dt dx = (V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} - V_{a,P}^n c_{a,P}^n) \Delta x$$

$$I_2 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} f_z \frac{P_{t,z}}{l_z} |Q| c \Delta x_z dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(f_z \frac{P_{t,z}}{l_z} |Q| \Delta x_z \right)_P \Delta x c_P \right] dt \Rightarrow$$

$$I_2 = \left(f_z \frac{P_{t,P,z}}{l_{P,z}} |Q_P|^{n+1} \right) \Delta x_z c_P^{n+1} \Delta x \Delta t$$

$$I_3 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{|Q_{a,z}| c_{a,z}}{l_z} \Delta x_z dt dx = \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\frac{|Q_{a,z}|}{l_z} \Delta x_z \right)_P \Delta x c_{a,P} \right] dt \Rightarrow$$

$$I_3 = \frac{|Q_{a,P,z}|^{n+1}}{l_{P,z}} \Delta x_z c_{a,P}^{n+1} \Delta x \Delta t$$

$$I_4 = \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} (\gamma_z V_{a,z} c_{a,z}) dt dx = \int_t^{t+\Delta t} [(\gamma_z V_{a,z} c_{a,z})_P \Delta x] dt \Rightarrow$$

$$I_4 = \gamma_P^{n+1} V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} \Delta x \Delta t$$

Αντικαθιστώντας στην (4.36):

$$(V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} - V_{a,P}^n c_{a,P}^n) \Delta x = \left(f_z \frac{P_{t,P,z}}{l_{P,z}} |Q_P|^{n+1} \Delta x_z \right) c_P^{n+1} \Delta x \Delta t +$$

$$- \left(\frac{|Q_{a,P,z}|^{n+1}}{l_{P,z}} \Delta x_z \right) c_{a,P}^{n+1} \Delta x \Delta t - \gamma_P^{n+1} V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} \Delta x \Delta t$$

Και πολλαπλασιάζοντας και τα δύο μέλη με $\frac{1}{\Delta x \Delta t}$:

$$\begin{aligned} (V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} - V_{a,P}^n c_{a,P}^n) \frac{1}{\Delta t} &= (f_z \frac{P_{t,P,z}}{l_{P,z}} |Q_P|^{n+1} \Delta x_z) c_P^{n+1} + \\ &- \left(\frac{|Q_{a,P,z}|^{n+1}}{l_{P,z}} \Delta x_z \right) c_{a,P}^{n+1} + \\ &- \gamma_P^{n+1} V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} - V_{a,P}^n c_{a,P}^n) \frac{1}{\Delta t} &= (f_z \frac{P_{t,P,z}}{l_{P,z}} |Q_P|^{n+1} \Delta x_z) c_P^{n+1} + \\ &- \frac{|Q_{a,P,z}|^{n+1}}{l_{P,z}} \Delta x_z c_{a,P}^{n+1} - \gamma_P^{n+1} V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} \end{aligned}$$

Ομαδοποιώντας τους όρους που έχουμε, παίρνουμε τη **διακριτοποιημένη** εξίσωση διατήρησης μάζας για τις κυψελίδες ίση με,

$$\begin{aligned} &- \left(f_z P_{t,z} |Q|^{n+1} \frac{\Delta x_z}{l_z} \right)_P c_P^{n+1} + \left[1 + \left(\frac{|Q_{a,z}|^{n+1} \Delta x_z}{V_{a,P}^{n+1} l_z} \right)_P \Delta t + \gamma_P^{n+1} \Delta t \right] V_{a,P}^{n+1} c_{a,P}^{n+1} = \\ &= V_{a,P}^n c_{a,P}^n \quad (4.37) \end{aligned}$$

5. Σύνοψη – Μελλοντικοί Στόχοι

Στην παρούσα διπλωματική εργασία έγινε προσπάθεια μοντελοποίησης του αναπνευστικού συστήματος και συγκεκριμένα του πνεύμονα, με στόχο την εξαγωγή σχέσεων για τη μεταφορά και την εναπόθεση του αερολύματος στις περιοχές αυτές. Αναλυτικότερα, έχοντας ως βάση το μοντέλο A του Weibel, και με τη χρήση του μοντέλου της τρομπέτας, το μοντέλο ανήχθη σε ένα Οϊλεριανό μονοδιάστατο πρόβλημα (1-D Eulerian Model), με βάση γεωμετρικές τιμές από πειραματικά δεδομένα του Weibel.

Το ξεχωριστό κομμάτι της συγκεκριμένης εργασίας είναι ο «ιδιαιτερός» όγκος ελέγχου που χρησιμοποιούμε για τη διακριτοποίηση των εξισώσεων με βάση τη μέθοδο των πεπερασμένων όγκων ελέγχου, ο οποίος διαφέρει από τον αντίστοιχο που χρησιμοποιούσαμε για το ίδιο πρόβλημα σε διαφορετικό μοντέλο του εργαστηρίου. Συγκεκριμένα, σε προηγούμενο μοντέλο θεωρούσαμε όλες τις κυψελίδες μίας γενιάς ως ένα δοχείο πλήρους ανάμιξης όγκου ίσου με το συνολικό άθροισμα των όγκων των κυψελίδων στη γενιά z, με αποτέλεσμα στην κάθε γενιά όλες οι κυψελίδες να έχουν την ίδια συγκέντρωση αερολύματος. Έτσι λοιπόν είναι φανερό ότι η βασική διαφορά που προκύπτει μεταξύ του προηγούμενου και του καινούργιου όγκου ελέγχου είναι ότι οι κυψελίδες της κάθε γενιάς δεν χαρακτηρίζονται από μία «καθολική» συγκέντρωση που μεταβάλλεται σε κάθε γενιά, αλλά από διάφορες συγκεντρώσεις που χαρακτηρίζουν κάθε φορά τον εκάστοτε «δακτύλιο» που φέρει περιφερειακά τις κυψελίδες και όχι ολόκληρη τη γενιά. Επομένως, με τον νέο όγκο ελέγχου πετυχαίνουμε μία πιο ρεαλιστική παρουσίαση της συγκέντρωσης αερολύματος που επικρατεί στις κυψελίδες. Επιπλέον πρέπει να τονίσουμε ότι λόγω της θεωρίας της «Χαοτικής Ανάμιξης» που επικρατεί σε κάθε μία κυψελίδα, μπορούμε με ασφάλεια να οδηγηθούμε στο συμπέρασμα ότι ο όγκος ελέγχου που επιλέγουμε για το πρόβλημα έχει λογική ευστάθεια και ότι όλες οι κυψελίδες που βρίσκονται στη περίμετρο του δακτυλίου έχουν την ίδια συγκέντρωση.

Στην συνέχεια της εργασίας, παρουσιάστηκε ένας επαναπροσδιορισμός των μεγεθών του πνεύμονα, με τροποποίηση των τιμών του μοντέλου του Weibel, με τη δυνατότητα χρήσης των τιμών του νέου μοντέλου να κρίνεται άξια περισσότερης μελέτης και εξερεύνησης.

Ακολουθώντας, αναλύθηκε λεπτομερέστερα το μοντέλο που ακολουθήθηκε, με βάση το οποίο εξήχθησαν οι εξισώσεις διατήρησης μάζας που διέπουν τη μεταφορά και την εναπόθεση των σωματιδίων στον πνεύμονα κατά την εισπνοή και εκπνοή. Επίσης, ποσοτικοποιήθηκαν με περισσότερη ανάλυση οι ογκομετρικές παροχές του αέρα που ρέει στους αεραγωγούς και στις κυψελίδες, έτσι ώστε να γίνει περισσότερο κατανοητή η κίνηση του ρευστού μέσα στους πνεύμονες.

Για την αριθμητική ανάλυση των εξισώσεων διατήρησης μάζας του αερολύματος, χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος των πεπερασμένων όγκων ελέγχου με βάση τον νέο όγκο ελέγχου που χρησιμοποιήσαμε. Έτσι λοιπόν, οι εξισώσεις διατήρησης μάζας αναλύθηκαν αριθμητικά, με αποτέλεσμα την εξαγωγή εξισώσεων για την συγκέντρωση της μάζας του αερολύματος σε αεραγωγούς και κυψελίδες, για τις διαδικασίες της εισπνοής και της εκπνοής αντίστοιχα.

Με το πέρας της εκπόνησης της διπλωματικής εργασίας, δημιουργείται η ανάγκη εφαρμογής του μοντέλου που αναπτύχθηκε με τη βοήθεια κάποιου προγραμματιστικού περιβάλλοντος, με σκοπό την εξαγωγή αποτελεσμάτων για τη συγκέντρωση αερολύματος στα διάφορα τμήματα του πνεύμονα και τη σύγκρισή τους με ανάλογες πειραματικές τιμές. Με τον τρόπο αυτό, μπορεί να διαπιστωθεί η καταλληλότητα των υποθέσεων, των παραδοχών και κυρίως του νέου όγκου ελέγχου που χρησιμοποιήσαμε για το συγκεκριμένο πρόβλημα.

Είναι σημαντικό να τονιστεί, ότι στη συγκεκριμένη εργασία αναφέρθηκαν συνοπτικά οι σχέσεις που λαμβάνουν υπόψη τη συστολή και διαστολή της διαμέτρου των αεραγωγών της κάθε γενιάς και περιγράφεται ένα αποδεκτό μοντέλο ελαστικότητας, ώστε να λαμβάνει υπόψη την αλλαγή στη διατομή των αεραγωγών σε σχέση με το χρόνο. Παρόλα αυτά, στο μοντέλο μας, η διατομή των αεραγωγών θεωρείται σταθερή και ανεξάρτητη από τον χρόνο. Επομένως η εφαρμογή των σχέσεων για την αλλαγή της διατομής των αεραγωγών με το χρόνο πιθανόν να βελτιώνει την πρόβλεψη της μεταφοράς και εναπόθεσης των σωματιδίων στο αναπνευστικό σύστημα.

Όπως αναλύθηκε στο δεύτερο κεφάλαιο, υπάρχουν αρκετοί παράγοντες που αφορούν τη δομή του πνεύμονα (χονδροειδής δακτύλιοι, cilia) ή τη ροή του αέρα (στροβιλισμοί, δευτερεύοντες ροές) οι οποίοι, κυρίως στις αρχικές γενιές, επηρεάζουν τη ρευστοδυναμική και την εναπόθεση της ροής των σωματιδίων στον πνεύμονα. Θα ήταν λοιπόν σκόπιμο, να μπορέσει με κάποιο τρόπο να προβλεφθεί η επιρροή αυτών των παραγόντων στην εναπόθεση των σωματιδίων στις αρχικές γενιές.

Τέλος, επειδή στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκαν τα γεωμετρικά δεδομένα, διάμετρος και μήκος, του μοντέλου του Weibel όπως παρουσιάζονται στο βιβλίο του Finlay, εναλλακτικά θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν οι τροποποιημένες τιμές των γεωμετρικών χαρακτηριστικών των αεραγωγών όπως παρουσιάζεται από τους Tsuda et al. (Tsuda A., Henry FS, Butler JP, 2008).

Βιβλιογραφία

- Asgharian, B., & Anjilvel, S. (1994). A Monte Carlo calculation of the deposition efficiency of inhaled particles in lower airways. *Journal of aerosol science*, 25(4), 711-721.
- Balásházy, I., Martonen, T. B., & Hofmann, W. (1990). Inertial impaction and gravitational deposition of aerosols in curved tubes and airway bifurcations. *Aerosol Science and Technology*, 13(3), 308-321.
- Brenner, H., & Edwards, D. *Macrotransport Processes*. Boston: Butterworth-Heinemann, 1993.
- Choi, J. I., & Kim, C. S. (2007). Mathematical analysis of particle deposition in human lungs: an improved single path transport model. *Inhalation toxicology*, 19(11), 925-939.
- Cai, F. S., & Yu, C. P. (1988). Inertial and interceptional deposition of spherical particles and fibers in a bifurcating airway. *Journal of Aerosol Science*, 19(6), 679-688.
- Cussler, E. L. *Diffusion: Mass Transfer in Fluid Systems, 3rd Edition*, Cambridge University Press, 2009.
- Egan, M. J., & Nixon, W. (1985). A model of aerosol deposition in the lung for use in inhalation dose assessments. *Radiation Protection Dosimetry*, 11(1), 5-17.
- Einstein, A. (1905). Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen. *Annalen der physik*, 322(8), 549-560.
- Finlay, W. H. *The mechanics of inhaled pharmaceutical aerosols: An Introduction*, Academic press, 2001.
- F. Filippitzis, K. Gourgoulianis, Z. Daniil and V. Bontozoglou. The Effect of Alveolar Mixing on Particle Transport and Deposition, Investigated by Dynamic Single-Path Model, 2019 (Under Review).
- Φιλιππιτζής, Φ. (2016) *Μοντελοποίηση κατά Euler μεταφοράς και εναπόθεσης σωματιδίων σε πνευμονικές ροές*, Διπλωματική Εργασία, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας.
- Georgakakou, S., Gourgoulianis, K., Daniil, Z., & Bontozoglou, V. (2016). Prediction of particle deposition in the lungs based on simple modeling of alveolar mixing. *Respiratory physiology & neurobiology*, 225, 8-18.

- Heyder, J., Gebhart, J., & Scheuch, G. (1985). Interaction of diffusional and gravitational particle transport in aerosols. *Aerosol science and technology*, 4(3), 315-326.
- Heyder, J., & Gebhart, J. (1977). Gravitational deposition of particles from laminar aerosol flow through inclined circular tubes. *Journal of Aerosol Science*, 8(4), 289-295.
- Henry, F. S., Laine-Pearson, F. E., & Tsuda, A. (2009). Hamiltonian chaos in a model alveolus. *Journal of biomechanical engineering*, 131(1), 011006.
- Henry, F. S., Butler, J. P., & Tsuda, A. (2002). Kinematically irreversible acinar flow: a departure from classical dispersive aerosol transport theories. *Journal of Applied Physiology*, 92(2), 835-845.
- Ingham, D. B. (1975). Diffusion of aerosols from a stream flowing through a cylindrical tube. *Journal of Aerosol Science*, 6(2), 125-132.
- Koegelenberg, C. F. N., Swart, F., & Irusen, E. M. (2013). Guideline for office spirometry in adults, 2012. *SAMJ: South African Medical Journal*, 103(1), 52-61.
- Lambert, R. K., Wilson, T. A., Hyatt, R. E., & Rodarte, J. R. (1982). A computational model for expiratory flow. *Journal of applied physiology*, 52(1), 44-56.
- Quanjer, P. H., Tammeling, G. J., Cotes, J. E., Pedersen, O. F., Peslin, R., & Yernault, J. C. (1993). Lung volumes and forced ventilatory flows. *European Respiratory Journal*, 16, 5-40.
- Ottino, J.M., *The Kinematics of Mixing: Stretching, Chaos and Transport*, Cambridge University Press, 1989.
- Ochs, M., Nyengaard, J. R., Jung, A., Knudsen, L., Voigt, M., Wahlers, T., Richter, J. & Gundersen, H. J. G. (2004). The number of alveoli in the human lung. *American journal of respiratory and critical care medicine*, 169(1), 120-124.
- Polak, A. G. (1998). A forward model for maximum expiration. *Computers in biology and medicine*, 28(6), 613-625.
- Patankar SV. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York: Hemisphere, 1980.
- Shier, D., Butler, J., Lewis, R. *Hole's Human Anatomy & Physiology*, McGraw-Hill Education, 2015.
- Scherer, P. W., Shendalman, L. H., Greene, N. M., & Bouhuys, A. (1975). Measurement of axial diffusivities in a model of the bronchial airways. *Journal of Applied Physiology*, 38(4), 719-723.
- Tsuda, A., Henry, F. S., & Butler, J. P. (2008). Gas and aerosol mixing in the acinus. *Respiratory physiology & neurobiology*, 163(1-3), 139-149.

Tsuda, A., Laine-Pearson, F. E., & Hydon, P. E. (2011). Why chaotic mixing of particles is inevitable in the deep lung. *Journal of theoretical biology*, 286, 57-66.

Tsuda, A. K. I. R. A., Henry, F. S., & Butler, J. P. (1995). Chaotic mixing of alveolated duct flow in rhythmically expanding pulmonary acinus. *Journal of Applied Physiology*, 79(3), 1055-1063.

Tsuda, A., Laine-Pearson, F. E., & Hydon, P. E. (2011). Why chaotic mixing of particles is inevitable in the deep lung. *Journal of theoretical biology*, 286, 57-66.

Taylor, G.I., *Low Reynolds Number Flow(16mmFilm)*, Educational Services Inc., Newton,MA, 1960.

Vander, A ,Sherman, J.,Luciano, D., *Human Physiology:The Mechanisms of Body Function*, 8th edition, McGraw-Hill, 2001.

Weibel, E. R., Sapoval, B., & Filoche, M. (2005). Design of peripheral airways for efficient gas exchange. *Respiratory physiology & neurobiology*, 148(1-2), 3-21.

Weibel, E. R., Cournand, A. F., & Richards, D. W. *Morphometry of the human lung (Vol. 1)*, Berlin: Springer, 1963.

Wark, K., & Warner, C. *Air Pollution - Its Origin and Control Second Edition (2nd ed.)*. Harper & Row,1981.